
Detaillierte numerische Simulationen von flugtriebwerksrelevanten Zweiphasenströmungen

Vom Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt
zur
Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

von

Dipl.-Ing. Nikolaos Spyrou

aus Frankfurt am Main

Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka
Mitberichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer
Tag der Einreichung:	22. November 2010
Tag der mündlichen Prüfung:	09. Februar 2011

Darmstadt 2011

D 17



Kurzfassung der Dissertation

„Detaillierte numerische Simulationen von
flugtriebwerksrelevanten Zweiphasenströmungen“
von Nikolaos Spyrou

In dieser Arbeit werden numerische Simulationen von Gas-Flüssigkeit-Zweiphasenströmungen unter Berücksichtigung der Phasengrenze zwischen den beteiligten Fluiden durchgeführt, wobei der Fokus auf Prozessen liegt, welche für die Kraftstoffzerstäubung in Flugtriebwerken relevant sind. Die numerische Untersuchung der Phasengrenzendynamik und des Primärzerfalls kann dazu beitragen, das Verständnis der komplexen Vorgänge an der Phasengrenze zu erhöhen und so prädiktiven Zerfallsmodellen einen kleinen Schritt näher zu kommen. Die in dieser Arbeit untersuchten Konfigurationen sind so ausgewählt, dass die verschiedenen Aspekte, die bei der Kraftstoffzerstäubung in Flugtriebwerken eine Rolle spielen, Berücksichtigung finden. Es werden ein schubspanungsgetriebener flüssiger Wandfilm in beschleunigter Luftströmung, der Strahlzerfall eines Kerosinjets in einer senkrecht dazu verlaufenden Luftströmung, und der Zerfall eines flüssigen Wandfilms, welcher am Ende der filmtragenden Wand zwei Luftströmen ausgesetzt ist, numerisch untersucht. Dabei werden die Simulationsergebnisse experimentellen Daten gegenübergestellt und besonderes Augenmerk auf die Beschreibung der Phasengrenzendynamik gelegt, welche bei Primärzerfallsprozessen einer detaillierten experimentellen Untersuchung in der Regel nicht zugänglich ist. Am Beispiel des letztgenannten Falls wird ein Konzept vorgestellt, welchem der Gedanke zugrunde liegt, einen Zerstäubungsvorgang mittels Direkter Numerischer Simulation (DNS) zu berechnen, ohne die detaillierte Geometrie der Zerstäubungsapparatur in der DNS abbilden zu müssen. Dazu wird nur das interessierende Teilgebiet in der DNS abgebildet und die Randbedingungen für die Ränder des gewählten DNS-Gebietes durch separate Simulationen zuvor berechnet. Darüber hinaus wird der Einfluss einzelner Parameter auf das dynamische Verhalten der Phasengrenze isoliert, was experimentell oftmals nicht zu bewerkstelligen ist. Zur numerischen Untersuchung wird ein auf der Volume-of-Fluid-Methode (VoF) basierendes Verfahren zur Erfassung der Phasengrenze eingesetzt. Der Vorteil von VoF-Verfahren liegt darin, dass sie konservativ sind und starke Topologieänderungen der Phasengrenze abbilden können.



Erklärung zur Dissertation

Hiermit versichere ich die vorliegende Dissertation ohne Hilfe Dritter nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Alle Stellen, die aus Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Nikolaos Spyrou

Frankfurt, den 22. November 2010



Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt im Rahmen des Graduiertenkollegs „Instationäre Systemmodellierung von Flugtriebwerken“. Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka, dem Leiter des Fachgebiets, für die Ermöglichung dieser Arbeit, seine Betreuung und das mir entgegengebrachte Vertrauen. Ebenfalls danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer für die schnelle und unkomplizierte Übernahme des Korreferats.

Bei Prof. Dr rer. nat. Amsini Sadiki möchte ich mich für die zahlreichen anregenden Diskussionen bedanken, seine Tür stand jederzeit offen. Auch bei Elisabeth Zweyrohn möchte ich mich für die Unterstützung in den vielen wichtigen Belangen neben den fachlichen Inhalten am Fachgebiet bedanken. Christian Klewer, Jens Kühne, Thomas Breitenberger und Markus Schmitt danke ich für ihren Einsatz bei der Verwaltung und Pflege der Hauptarbeitsmittel eines Numerikers, den Rechnern. Für das angenehme Arbeitsklima und eine gute Zeit möchte ich mich bei allen Kollegen bedanken.

Besonders danken möchte ich meinen Kollegen und Freunden Dr.-Ing. Du-Fhan Choi, Dr.-Ing. Thomas Kania, Cem Ertem, Simone Eisenhuth, Verena Klapdor und Anna Schwarz für ihre Ratschläge und Anregungen, die maßgeblich zu dieser Arbeit beigetragen haben und für die unvergessliche gemeinsame Zeit am und außerhalb des Fachgebiets. Weiterer Dank geht an meine Freunde Robert Ogonowski, Antonio Fortuna, Stavros Pylouras und Christoph Starke.

Ohne meine Familie würde ich heute diesen Text nicht schreiben. Sie haben mich unterstützt und an mich geglaubt, wofür ich endlos dankbar bin.

Ein besonders herzlicher Dank geht an meine Freundin Julia, die seit Beginn meines Studiums in gleicher Weise wie meine Familie an mich glaubt und mich unterstützt.



Für Evangelia, Sofia, Konstantina, Xenofon und Julia.



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation und Problemstellung	1
1.2	CFD-Methoden für Zweiphasenströmungen	4
1.3	Stand der Forschung	10
1.4	Gegenstand der Arbeit und Vorgehensweise	11
1.5	Gliederung der Arbeit	13
2	Theoretische Grundlagen	15
2.1	Kontinuumsmechanische Grundgleichungen einphasiger Strömungen . . .	15
2.2	Newtonsches Materialgesetz und Inkompressibilität	16
2.3	Turbulenz	18
2.4	Modellierung und Simulation von Turbulenz	20
2.4.1	Feinstruktur-Modellierung	25
2.5	Beschreibung zweiphasiger Strömungen	27
2.5.1	Randbedingungen an der Phasengrenze	28
2.5.2	Navier-Stokes-Gleichungen für Zweiphasenströmungen	30
2.5.3	Phasengrenzen auflösende Verfahren	30
2.6	Zusammenfassung der Gleichungen	34
3	Numerische Beschreibung	39
3.1	Diskretisierung räumlicher Terme	40
3.2	Zeitdiskretisierung	46
3.3	Gleichungssystem und Linearisierung	47
3.4	Druck-Geschwindigkeit-Kopplung	49
3.5	Randbedingungen	50
4	Analytische Testfälle zur Code-Verifizierung	53
4.1	Testfälle für die Advektion	53
4.1.1	Rotation einer Kreisscheibe mit Schlitz	53
4.1.2	Quadrat in einer Wirbelströmung	54
4.2	Testfall für die Oberflächenspannung - Kapillarwellen	55
4.3	Testfall für Auftriebskräfte - Rayleigh-Taylor-Instabilität	58
4.4	Zusammenfassung	59

5 Simulationen experimentell untersuchter Konfigurationen	61
5.1 Beschleunigte Filmströmung im ebenen Kanal	61
5.1.1 Beschreibung der Konfiguration	62
5.1.2 Betriebsparameter und Rechengitter	63
5.1.3 Randbedingungen und Simulationsparameter	65
5.1.4 Ergebnisse	66
5.2 Large-Eddy-Simulation eines Kerosin-Jets in einer Querströmung	68
5.2.1 Beschreibung der Konfiguration	68
5.2.2 Numerisches Rechengebiet	71
5.2.3 Betriebsparameter und Rechengitter	74
5.2.4 Randbedingungen und Simulationsparameter	77
5.2.5 Ergebnisse	79
6 Eingebettete DNS am Beispiel eines generischen Testfalls	87
6.1 Geometrie	88
6.2 Simulationen zur Erzeugung von Randbedingungen für die DNS	90
6.3 Ergebnisse	94
7 Zusammenfassung und Ausblick	103
Literaturverzeichnis	107

Nomenklatur

Lateinische Symbole		Einheit
\mathcal{A}	lineares algebraisches Gleichungssystem	variabel
$[A]$	quadratische Koeffizientenmatrix	variabel
C_s	Smagorinsky-Konstante	—
C_γ	Konstante für den Kompressionsterm	—
C_k, C_ε	Modellkonstanten im Eingleichungsmodell nach Yoshizawa	—
$[D]$	quadratische Diagonalkoeffizientenmatrix	variabel
\mathbf{d}	Abstandsvektor zwischen benachbarten Kontrollvolumen	m
E	prozentualer Fehler	—
$E(\kappa)$	Energiespektrum der Turbulenz	$\text{m}^3 \text{s}^{-2}$
F	Massenfluss	kg s^{-1}
\mathbf{g}	Gravitationsvektor	m s^{-2}
\mathbf{I}	Einheitsmatrix	—
k	turbulente kinetische Energie	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
k	Kreiswellenzahl	m^{-1}
\mathbf{k}	nicht-orthogonaler Anteil des Flächenvektors	m^2
$[N]$	quadratische Nebenkoeffizientenmatrix	variabel
N	Anzahl	—
\mathbf{n}	Einheitsnormalenvektor	—
P	kinematischer Druck	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
p	Druck	$\text{kg s}^{-2} \text{m}^{-1}$
p^*	modifizierter Druck	$\text{kg s}^{-2} \text{m}^{-1}$
$[R]$	Quelltermvektor	variabel
\mathbf{S}	Deformationsgeschwindigkeitstensor	s^{-1}
\mathbf{S}	Flächenvektor	m^2
S	Oberfläche	m^2
S	Quellterm	variabel
T	Temperatur	K

t	Zeit	s
\mathbf{U}	Geschwindigkeitsvektor	m s^{-1}
\mathbf{U}_r	Kompressionsgeschwindigkeitsvektor	m s^{-1}
u, v, w	Geschwindigkeitskomp. im kartesischen Koordinatensystem	m s^{-1}
u_η	Geschwindigkeitsmaß der Kolmogorovschen Längenskala	m s^{-1}
V	Volumen	m^3
\mathbf{x}	Ortsvektor	m

Griechische Symbole		Einheit
α	Level Set Variable	m
Γ_ϕ	Diffusionskoeffizient	variabel
γ	Volume of Fluid Variable	—
Δ	orthogonaler Anteil des Flächenvektors	m^2
Δ	Differenz	variabel
δ	Dirac-Funktion	—
δ_s	kleiner skalarer Wert zur Stabilisierung	—
ε	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$
η	Kolmogorovsche Längenskala	m
κ	Krümmung der Phasengrenze	m^{-1}
κ	Wellenzahl	m^{-1}
μ, μ_{eff}	molekulare und effektive dynamische Viskosität	$\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-1}$
ν, ν_{sgs}	kinematische molekulare Viskosität und Wirbelviskosität	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
ρ	Dichte	kg m^{-3}
σ	Oberflächenspannung	kg s^{-2}
τ	Spannungstensor	$\text{kg s}^{-2} \text{m}^{-1}$
τ_η	Zeitmaß der Kolmogorovschen Längenskala	s
ϕ	tensorielle Größe	variabel
ϕ	volumetrischer Fluss	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$
χ	tensorielle Größe	variabel
Ω	Winkelgeschwindigkeit	rad s^{-1}

Tiefgestellte Indizes

c	charakteristische Größe
j	je Raumrichtung
sgs	Feinstrukturgröße
$1, 2, k$	Kennzeichnung der jeweiligen Phase
i	Kennzeichnung der Phasengrenze
KV	Kontrollvolumen
P	Wert im Schwerpunkt des betrachteten Kontrollvolumens
f	Wert auf einer Kontrollvolumenfläche
N	Wert im Schwerpunkt des benachbarten Kontrollvolumens
$expl$	explizit diskretisierter Quellterm
$impl$	implizit diskretisierter Quellterm

Hochgestellte Indizes

T	transponiert
$'$	Schwankungswert, Feinstrukturwert
n	Wert zur Zeit $t + \Delta t$
$n - 1, n - 2$	Wert zur Zeit $t, t - \Delta t$

Abkürzungen

BD	Backward Differencing
CD	Central Differencing
CFD	Computational Fluid Dynamics
CN	Crank-Nicholson-Verfahren
CSF	Continuum Surface Force
CSS	Continuum Surface Stress
DAC	Double Annular Combustor
DNS	Direkte Numerische Simulation
FVM	Finite Volumen Methode
GFM	Ghost Fluid Methode
KV	Kontrollvolumen
LES	Large Eddy Simulation
LPP	Lean Premixed Prevaporized
NO_x	Stickoxide
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes

RQL	Rich Burn Quick Quench Lean Burn
UD	Upwind Differencing
VoF	Volume of Fluid

1 Einleitung

1.1 Motivation und Problemstellung

Der Prozess der Zerstäubung bezeichnet den Zerfall eines zusammenhängenden Flüssigkeitsvolumens in eine Vielzahl kleiner Tropfen, einem sogenannten Spray. Der Alltagsbegriff Spray ruft bei den meisten Menschen zunächst Assoziationen mit Anwendungen aus dem Kosmetik- und Medizinbereich hervor. Mit zunehmender Bedenkzeit wird die Liste der Sprayanwendungen länger und schließlich erweist es sich als schwierig, Anspruch auf Vollständigkeit der Liste zu erheben. Lackierung von Automobilkarosserien, Tintenstrahldruck oder Kraftstoffeinspritzung in Verbrennungssystemen dienen an dieser Stelle als Beispiele aus der Industrie.

Eine hohe Bedeutung von globalem Ausmaß kommt der Zerstäubung zu, wenn sie in Verbindung mit der Verbrennung flüssiger Kraftstoffe betrachtet wird. Durch die Verbrennung flüssiger Kraftstoffe sind im Jahr 2007 34% des weltweiten Energiebedarfs bereitgestellt worden und Schätzungen zufolge wird der Anteil im Jahr 2030 bei 30% liegen [35]. Die Kraftstoffzerstäubung hat einen großen Anteil am Ablauf von Verbrennungsprozessen, sie beeinflusst das Zündverhalten, die Effizienz und Schadstoffemissionen von Verbrennungssystemen [50]. Angesichts der Ressourcenknappheit primärer Energieträger und der globalen Erderwärmung sind die Deckung des weltweiten Energiebedarfs und die Minimierung des durch den Menschen bewirkten Klimawandels die globalen Herausforderungen, welche es die kommenden Jahrzehnte zu bewältigen gilt. Die Nutzung regenerativer Energiequellen macht heute keinen nennenswerten Anteil am weltweiten Energieumsatz aus und Schätzungen zufolge wird es noch einige Jahrzehnte dauern, bis es soweit ist. Bis dahin gilt es, schonender mit den vorhandenen Ressourcen umzugehen und den Schadstoffausstoß zu senken.

Vor diesem Hintergrund stehen diverse Industriebranchen unter politischem und gesellschaftlichem Druck, neue Technologien zu entwickeln und bestehende zu verbessern. Als Beispiel hierfür kann die stetige Senkung der zur Zertifizierung zulässigen Schadstoffemissionen im Bereich der Automobil- und Flugindustrie angeführt werden. Die Kraftstoffzerstäubung stellt ein wichtiges Teilgebiet dar, um diesen Zielen näher zu kommen.

Im Automobilsektor sind in den letzten Jahren eine Reihe alternativer Antriebsformen auf dem Vormarsch, wie zum Beispiel das Hybrid- oder Elektroauto, während im Luftverkehr die Gasturbine aufgrund ihrer hohen Leistungsdichte konkurrenzlos bleibt und für den Sektor der Luftfahrt keine alternativen Antriebe absehbar sind. Eine Erhöhung der Effizienz von Flugtriebwerken beruht im Wesentlichen auf der Optimierung des thermodynamischen Kreisprozesses, indem das Druck- und Temperaturniveau in der Brennkammer angehoben wird. Fortschritte in der Werkstofftechnologie und im Bereich der Schaufelkühlung machen eine Anhebung des Temperaturniveaus realisierbar. Nachteilig wirkt sich dabei aus, dass durch höhere Temperaturen die Emissionen von thermischen Stickoxiden (NO_x) steigen. Dies ist nicht tragbar, da NO_x toxisch ist, zu photochemischem Smog und saurem Regen führt und zum Abbau der Ozonschicht beiträgt [34].

Der Schlüssel zur Reduktion des NO_x -Ausstoßes liegt darin, alternative Verbrennungskonzepte in Gasturbinen zu entwickeln. Das Ziel ist, Vormischflammen in Flugtriebwerken einzusetzen, da es diese gegenüber Diffusionsflammen ermöglichen, das Äquivalenzverhältnis zwischen Kraftstoff und Luft in der Reaktionszone so einzustellen, dass die Verbrennung nicht stöchiometrisch, sondern im mageren Bereich ablaufen kann. Dadurch können Temperaturspitzen und die damit verbundene NO_x -Produktion vermieden werden. Das Konzept der mageren vorgemischten Verbrennung in Flugtriebwerken nennt sich LPP¹ [24], [47].

Die Anforderungen an die Kraftstoffaufbereitung für den LPP-Betrieb sind hoch, da lokal eine homogene Durchmischung des Kraftstoffes mit der Luft erzielt werden muss, um das gewünschte Äquivalenzverhältnis in der Verbrennungszone einzustellen. Entstehen infolge einer schlechten Zerstäubung Kraftstoffstrahlen in der Primärzone, verschlechtern sich die Schadstoffemissionen signifikant, da im Bereich der Tropfen stöchiometrische Verhältnisse auftreten. Neben der Kraftstoffaufbereitung stellt der LPP-Betrieb ebenfalls hohe Anforderungen an die Betriebssicherheit der Flugtriebwerke, hinsichtlich der Gefahr der Selbstentzündung, des Flammenverlöschens und Brennkammerschwingungen infolge von Flammeninstabilitäten [49], [55]. Die hohen Anforderungen zur sicheren Umsetzung von LPP-Brennkammern erschweren zum jetzigen Zeitpunkt den Einsatz dieses Konzeptes. Alternativen sind die gestufte Verbrennung (DAC^2), wobei die Pilotzone Stabilität und Zünden der Brennkammer gewährleistet und die Hauptzone für den NO_x -Ausstoß bei Volllast optimiert ist, sowie die RQL³-Technik, bei der die Verbrennung im stöchiometrischen Bereich durch die intensive Zumischung von Luft schnell durchschritten wird.

¹ Lean Premixed Prevaporised Combustion

² Double Annular Combustor

³ Rich Burn Quick Quench Lean Combustion

Das aktuelle Hauptziel der Flugtriebwerkshersteller ist die Realisierung zuverlässiger LPP-Brennkammern. Die Umsetzung dieses Ziels hängt davon ab, ob durch die Kraftstoffzerstäubung sichergestellt werden kann, ein vorverdampftes Kraftstoff-Luft-Gemisch in der gewünschten Zusammensetzung zu erzeugen, bevor es in die Brennzone der Brennkammer gelangt. Dazu muss die Zerstäubung sehr effizient erfolgen, da ein sehr kleines Zeitfenster, von der Kraftstoffeinspritzung bis zur Zündung der Gemischbildung zur Verfügung steht. Das in allgemeiner Zustimmung favorisierte Zerstäubungskonzept für LPP-Brennkammern besteht darin, den flüssigen Kraftstoff senkrecht zur Luftströmung einzuspritzen. Dadurch kommt es zu einer starken Interaktion zwischen den Flüssigkeitsstrahlen und der Luftströmung, wodurch die Sprayerzeugung begünstigt wird.

Stand der Technik bei der Auslegung und Untersuchung von Zerstäubungsprozessen sind experimentelle Untersuchungen. Das bisher zusammengetragene Wissen reicht jedoch bei weitem nicht aus, um prädiktive Modelle für resultierende Tropfenverteilungsfunktionen anhand bekannter Eintritts- und Umgebungsbedingungen vorzuschlagen. Ein wesentlicher Aspekt, bei der Problematik, diesem Ziel näher zu kommen, ist die Schwierigkeit, die Dynamik und den Primärzerfall der Phasengrenze mit experimentellen Methoden zu untersuchen. Als Grund dafür ist anzuführen, dass bei der Zerstäubung ein dichtes Feld von flüssigen Fragmenten und Tropfen entsteht, welches den zerfallenden Flüssigkeitsstrahl einhüllt und die diagnostische Untersuchung der zerfallenden Phasengrenze kaum bis gar nicht ermöglicht. Eine Alternative zu experimentellen Untersuchungen bietet die numerische Strömungssimulation.

Der Einsatz der numerischen Strömungssimulation - im Folgenden CFD (Computational Fluid Dynamics) genannt - hat sowohl im industriellen, als auch im wissenschaftlichen Umfeld stetig zugenommen. Während die CFD für einphasige Strömungen zu einem festen Bestandteil des Designprozesses von Bauteilen technischer Anwendungen geworden ist, weitet sich der CFD-Anwendungsbereich auf die Berechnung komplexerer Prozesse aus, wie z.B. Verbrennungsprozesse und Zweiphasenströmungen. Diese Gebiete sind heute noch Gegenstand aktueller Forschungsarbeiten und weisen ein hohes Potential auf, Entwicklungszeiten zu reduzieren und Kosten einzusparen. Durch die seit Jahrzehnten stetige Zunahme an Rechenkapazität bietet die CFD das Potential, physikalische Prozesse beim Strahlzerfall abzubilden und so als zusätzliches Instrument zur Erforschung dieses Gebietes eingesetzt zu werden. Trotz der hohen zur Verfügung stehenden Rechenkapazität sind detaillierte numerische Simulationen für die Industrie heute noch nicht alltagstauglich und Simulationen auf diesem Gebiet beschränken sich auf forschende Einrichtungen. Die CFD von Zerfallsprozessen kann dazu beitragen, das Verständnis der komplexen Vorgänge an der Phasengrenze zu erhöhen und so prädikti-

ven Zerfallsmodellen einen kleinen Schritt näher zu kommen. Darüber hinaus lässt sich die Untersuchung von Zerfallsprozessen durch die CFD in dem Sinne vereinfachen, dass die Durchführung von Parametervariationen erheblich vereinfacht wird und so gezielt Einflüsse einzelner Parameter erforscht werden können.

In der vorliegenden Arbeit wird der primäre Strahlzerfall im düsennahen Bereich numerisch untersucht, wobei die ausgewählten Geometrien und Umgebungsbedingungen relevant für Zerstäubungsprozesse in Flugtriebwerken sind. Dabei wird der Fokus auf die Dynamik der Phasengrenze gelegt, dem Bereich, welcher experimentell schwer zu erfassen ist. Daher wird ein numerisches Verfahren angewandt, welches die Phasengrenze zwischen den beteiligten Fluiden auflöst.

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden zunächst in Abschnitt 1.2 CFD-Methoden zur Simulation von Zweiphasenströmungen vorgestellt, um die in dieser Arbeit verwendete CFD-Methode in den wissenschaftlichen Kontext einzuordnen. Anschließend wird in Abschnitt 1.3 der Stand der Forschung im Bereich der Simulation von Zerfallsprozessen aufgezeigt und in Kapitel 1.4 wird beschrieben, was Gegenstand und Ziele dieser Arbeit sind und die Vorgehensweise zur Umsetzung derselben dargestellt. Kapitel 1.5 gibt eine Gliederung der vorliegenden Arbeit.

1.2 CFD-Methoden für Zweiphasenströmungen

Für Zweiphasenströmungen existieren mehrere CFD-Methoden, da es zu ihrer Beschreibung unterschiedliche Modelle gibt. Die Vielfalt an Modellen folgt aus der Vielfalt an Erscheinungsformen von Zweiphasenströmungen. Bevor die wichtigsten CFD-Methoden für Zweiphasenströmungen erläutert werden, soll dies veranschaulicht werden.

Abbildung 1.1 zeigt eine schematische Einteilung von Zweiphasenströmungen in Abhängigkeit von der Topologie der Phasengrenze, auch Strömungsregime genannt. Je nachdem, ob eine kontinuierlich verlaufende Phasengrenze und eine damit klare räumliche Trennung der Phasen vorliegt oder eine der beiden Phasen Gebiete im Raum einnimmt, die nicht miteinander verbunden sind, spricht man von separierten oder dispersen Zweiphasenströmungen. Eine transitionelle Zweiphasenströmung ist eine Mischform beider Fälle. Die Gruppen der separierten, transitionellen und dispersen Strömungen lassen sich jeweils noch weiter unterteilen.

Obwohl Zweiphasenströmungen unabhängig vom Strömungsregime denselben fundamentalen Erhaltungsgleichungen genügen, ist es sinnvoll, das vorliegende Strömungsregime bei der Formulierung eines Modells vorab zu berücksichtigen. Dadurch können

Annahmen getroffen werden, welche die mathematische Behandlung erleichtern, jedoch im Gegenzug die Allgemeingültigkeit des betreffenden Modells reduzieren.

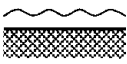
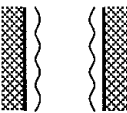
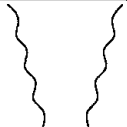
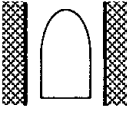
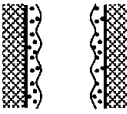
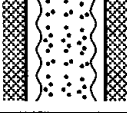
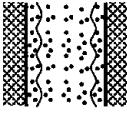
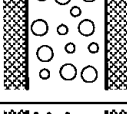
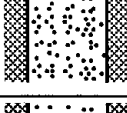
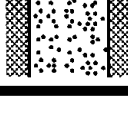
Class	Typical regimes	Geometry	Configuration	Examples
Separated flows	Film flow		Liquid film in gas Gas film in liquid	Film condensation Film boiling
	Annular flow		Liquid core and gas film Gas core and liquid film	Film boiling Boilers
	Jet flow		Liquid jet in gas Gas jet in liquid	Atomization Jet condenser
Mixed or Transitional flows	Cap, Slug or Churn-turbulent flow		Gas pocket in liquid	Sodium boiling in forced convection
	Bubbly annular flow		Gas bubbles in liquid film with gas core	Evaporators with wall nucleation
	Droplet annular flow		Gas core with droplets and liquid film	Steam generator
	Bubbly droplet annular flow		Gas core with droplets and liquid film with gas bubbles	Boiling nuclear reactor channel
Dispersed flows	Bubbly flow		Gas bubbles in liquid	Chemical reactors
	Droplet flow		Liquid droplets in gas	Spray cooling
	Particulate flow		Solid particles in gas or liquid	Transportation of powder

Abbildung 1.1: Klassifizierung von Zweiphasenströmungen, entnommen aus [36]

Die verschiedenen Ansätze zur numerischen Berechnung von Zweiphasenströmungen unterscheiden sich hinsichtlich des Rechenaufwandes, des Modellierungsaufwandes und der Einsetzbarkeit auf verschiedene Strömungsregime. Die Ansätze werden im

Folgenden erläutert, wobei auf die Phasengrenzen auflösenden Verfahren in Kapitel 2.5.3 detaillierter eingegangen wird.

Phasengrenzen auflösende Verfahren

Die fundamentalste Art, eine Zweiphasenströmung zu beschreiben ist es, sie in Gebiete aufzuteilen, in denen jeweils nur eine Phase vorliegt. Die Zweiphasenströmung setzt sich somit aus einphasigen Teilgebieten zusammen, welche durch die Phasengrenze und/oder durch die Berandung des Strömungsgebietes begrenzt sind. Die Lage der Phasengrenze ist zeitlich veränderlich und muss ebenfalls aus der Lösung hervorgehen. Da die Strömung in einphasige Teilgebiete zerlegt wird, können die Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung einphasiger Strömungen angewandt werden. Die Lösungen für jedes Teilgebiet sind durch geeignete Bedingungen an der Phasengrenze miteinander gekoppelt.

Da die Phasengrenze eine Singularität im Strömungsgebiet darstellt, an der sich Materialeigenschaften sprunghaft ändern, muss die Diskretisierung des Strömungsgebiets sehr fein gewählt werden. Diese hohe räumliche Auflösung resultiert daher häufig in einer Direkten Numerischen Simulation (DNS). Neben der hohen Auflösung, die bei Phasengrenzen auflösenden Verfahren erforderlich ist, sind auch spezielle numerische Techniken notwendig, um die Phasengrenze während der Simulation zu erfassen und ihren Transport geeignet zu diskretisieren. Handelt es sich bei der Zweiphasenströmung um ein Gas-Flüssigkeit-Gemisch oder um zwei nicht mischbare Flüssigkeiten, so muss auch die an der Phasengrenze auftretende Oberflächenspannung geeignet abgebildet werden. Diese Techniken sind abhängig von dem Ansatz, der zur Erfassung der Phasengrenze gewählt wird. Existierende Ansätze und eine mögliche Unterteilung sollen an dieser Stelle angeführt werden:

- **Interface-tracking-Ansatz:**

Bei Verfahren dieser Gruppe wird die Phasengrenze zu Beginn der Simulation direkt markiert und ihre aktuelle Position durch die Bewegung der verwendeten Markierer ermittelt. Als Markierer eignen sich zum Beispiel miteinander verbundene masselose Partikel, welche einmal auf der Phasengrenze platziert, dieser ständig folgen. Der Vorteil dieser Methode, welche z.B. in [65] und [86] Anwendung gefunden hat, liegt darin, dass sie sehr genau ist und die Anzahl der verwendeten Partikel zur Beschreibung der Phasengrenze unabhängig vom feststehenden Rechengitter ist. Eine weitere Möglichkeit zur Markierung der Phasengrenze besteht darin, Kontrollvolumen-Eckpunkte des Rechengitters als Markierer zu verwenden, welche wiederum der Bewegung der Phasengrenze folgen, siehe z.B. in [19]. Die

Folge ist ein sich ständig änderndes Gitter. Beide genannten Möglichkeiten bieten eine genaue und scharfe Darstellung der Phasengrenze. Als Nachteile sind zu nennen, dass im Falle starker Topologieänderungen der Phasengrenze - wie es beim Primärzerfall der Fall ist - der Aufwand dieser Methoden enorm ansteigt, weil im Fall der Partikel ständig welche hinzugefügt und entfernt werden müssen und im Fall des bewegten Gitters inakzeptable Verzerrungen der Gitterstruktur vermieden werden müssen [86]. Ein weiterer Nachteil ist, dass Topologieänderungen wie z.B. die Abspaltung eines Tropfens explizit zugelassen werden müssen und nicht automatisch erfolgen.

- **Interface-capturing-Ansatz:**

Methoden dieses Ansatzes vermeiden die Markierung der Phasengrenze selbst, und markieren stattdessen die beteiligten Fluide, welche durch die Phasengrenze getrennt sind. Dazu wird eine Indikatorfunktion herangezogen, welche wie alle anderen Variablen auf dem Rechengitter definiert ist. Diese Methoden unterscheiden sich in Abhängigkeit von der verwendeten Indikatorfunktion:

- **Volume of Fluid:**

Als Indikatorfunktion wird der Volumenanteil, den eine der beiden Phasen im jeweiligen Kontrollvolumen einnimmt, definiert. Eine eingehende Beschreibung findet sich in Kapitel 2.5.3. Dieser Vorschlag geht auf [32] zurück. Es sei hier erwähnt, dass Volume of Fluid als Sammelbegriff für mehrere Verfahren Verwendung findet, welche obige Definition der Indikatorfunktion gemeinsam haben. Ein wesentlicher Vorteil dieser Methoden ist, dass diese inhärent massenerhaltend sind und starke Topologieänderungen der Phasengrenze abgebildet werden können. Nachteilig wirken sich Ungenauigkeiten bei der Krümmungsberechnung der Phasengrenze und die Notwendigkeit numerischer Vorkehrungen zur Erhaltung einer möglichst scharfen Phasengrenze aus.

- **Level Set:**

Die Level-Set-Methode - näher beschrieben in Kapitel 2.5.3, geht auf Sussman et al. [84] zurück und verwendet als Indikatorfunktion eine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion, welche am Ort der Phasengrenze den Wert Null annimmt. Diese Methode ermöglicht eine genauere Krümmungsberechnung der Phasengrenze als die Volume-of-Fluid-Methode und der Transport der Abstandsfunktion bereitet numerisch keine besonderen Schwierigkeiten. Der Nachteil dieser Methode besteht darin, dass diese nicht inhärent massenkonservativ ist und starke Deformationen der Phasengrenze zu großen Massenverlusten führen können.

Für die Gruppe der Phasengrenzen auflösenden Verfahren gilt, dass sie aufgrund der feinen räumlichen Diskretisierung sehr rechenzeitintensiv sind und die Behandlung der Phasengrenze besondere Anforderungen an die Numerik stellt. Allerdings ist die Anzahl vereinfachender und somit einschränkender Annahmen für Verfahren dieser Gruppe sehr gering, so dass sie prinzipiell auf alle Zweiphasenströmungen anwendbar sind und sehr detaillierte Ergebnisse liefern. So müssen beispielsweise für die Simulation disperser Zweiphasenströmungen mittels Euler-Euler- oder Euler-Lagrange-Verfahren - diese Methoden werden im Anschluss vorgestellt - a priori Annahmen über die Verteilung und Größe der dispersen Elemente getroffen werden. Mittels Phasengrenzen auflösender Simulationen hingegen sind diese relevanten Parameter Bestandteil der errechneten Lösung. Somit eignen sich diese Verfahren u.a. dazu, Modelle zu entwickeln und zu validieren, oder komplexe Phänomene wie z.B. die Dynamik und Stabilität von Phasengrenzen zu untersuchen.

Im Folgenden werden die Euler-Euler- und die Euler-Lagrange-Methode kurz erläutert, für eine detaillierte Betrachtung wird auf entsprechende Arbeiten verwiesen.

Euler-Euler-Methode

Im Rahmen der Euler-Euler-Modellierung werden beide Phasen als Kontinuum beschrieben, selbst wenn eine der Phasen dispers vorliegt. Zur Herleitung der Euler-Euler-Gleichungen wird auf [12], [30], [36] verwiesen. Die Phasen durchdringen sich und für jede Phase wird jeweils ein Satz der Erhaltungsgleichungen gelöst. Die Gleichungssätze für jede Phase ähneln denen für einphasige Strömungen, enthalten aber noch zusätzliche Terme für den Austausch von Impuls und Masse zwischen den Phasen. Da die Gleichungen der Euler-Euler-Methode durch Mittelungsoperationen hergeleitet werden, was mit einem Informationsverlust verbunden ist, sind die zusätzlich auftretenden Terme zu modellieren. Formal ist die Euler-Euler-Formulierung nicht auf ein bestimmtes Strömungsregime beschränkt, sondern sowohl für separierte als auch disperse Strömungen und für Mischformen einsetzbar, da bei der Herleitung der Gleichungen keine Annahmen über die Topologie und Natur der Strömung getroffen werden.

Die Problematik, die Euler-Euler-Methode für beliebige Strömungsregime einzusetzen, liegt jedoch darin, die Zusatzterme, welche die Interaktion der Phasen beschreiben, geeignet zu modellieren, da die Modellierung der Terme selbst von der jeweiligen Art der Strömung abhängig ist. Die eingeschränkte Einsetzbarkeit dieser Methode begründet sich darin, dass für bestimmte Strömungsregime keine zufriedenstellende Modellierung der Zusatzterme vorliegt. Eine weitere Abhängigkeit der Zusatzterme entsteht bei der Herleitung der Euler-Euler-Gleichungen durch die Mittelungsoperation. Je nach Art

der angewandten Mittelung - zeitlich, räumlich oder Ensemble-gemittelt, siehe dazu [13], [36] - sind die entstehenden Zusatzterme entsprechend zu interpretieren, dadurch nimmt die Mittelungsoperation bei der Herleitung der Gleichungen Einfluss auf die Modellierung der Zusatzterme.

Im Vergleich zur Euler-Lagrange-Methode, welche im folgenden vorgestellt wird, weist die Euler-Euler-Methode Vorteile bei der Parallelisierung dieses Rechenverfahrens auf, da durch die Euler-Formulierung der beteiligten Phasen die Verteilung der derselben im Rechengebiet keinen Einfluss auf die Prozessorauslastung hat.

Euler-Lagrange-Methode

Die Euler-Lagrange-Methode ist auf die Berechnung disperser Strömungen beschränkt. Wie der Name erkennen lässt, wird die kontinuierliche Phase im Euler-Kontext und die disperse Phase im Lagrange-Kontext beschrieben. Während im Euler-Kontext die Variablen Funktionen von Raum und Zeit sind und somit als Felder dargestellt werden, werden im Lagrange-Kontext einzelne Partikel beschrieben, deren Geschwindigkeit und Ort nur noch eine Funktion der Zeit ist. Daher werden für die Euler-Phase in ähnlicher Weise wie in der Euler-Euler-Methode Erhaltungsgleichungen aufgestellt, während für die Partikel der dispersen Phase die Newtonsche Bewegungsgleichung aufgestellt wird, um deren Position und Geschwindigkeit zu ermitteln. Ist die Anzahl der Partikel in der dispersen Phase zu groß, werden mehrere Partikel zu einer Gruppe - einem sogenannten Parcel - zusammengefasst und die Newtonsche Bewegungsgleichung für die gesamte Gruppe gelöst.

Je nachdem wie die Phasen untereinander wechselwirken, unterscheidet man bei der Euler-Lagrange-Methode zwischen folgenden Kopplungen zwischen den Phasen. Beim *one-way-coupling* wird der Einfluss der dispersen auf die kontinuierliche Phase vernachlässigt. Daher kann für diesen Sonderfall bspw. eine stationäre einphasige Berechnung der kontinuierlichen Phase durchgeführt werden und anschließend die disperse Phase für beliebige Parametervariationen mit dem vorhandenen Strömungsfeld der Euler-Phase ermittelt werden. *Two-way-coupling* beschreibt den Fall, dass es eine Rückkopplung von der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase gibt. Wenn die Partikel untereinander interagieren, z.B. durch Kollisionseffekte, spricht man von *four-way-coupling*.

1.3 Stand der Forschung

Numerische Untersuchungen des primären Strahlzerfalls sind in das Gebiet Phasengrenzen auflösender Verfahren einzuordnen. Dem Autor sind keine Arbeiten bekannt, bei denen dazu der Interface-tracking-Ansatz eingesetzt wird. Als Grund ist wohl der bereits angesprochene steigende Aufwand dieser Verfahren bei starken Topologieänderungen der Phasengrenze anzuführen. Im Rahmen der Interface-capturing-Methoden sind einige Untersuchungen auf diesem Gebiet durchgeführt worden, die das Potential der numerischen Untersuchung von Zerstäubungsprozessen aufzeigen und auf die im Folgenden eingegangen werden soll.

Untersuchungen mit Relevanz für Zerstäubungsprozesse in Dieselmotoren sind u.a. von de Villers et al. [7], Bianchi et al. [4], Menard et al. [53], Desjardin et al. [10] und Ishimoto et al. [37] durchgeführt worden. Dabei handelt es sich um einen turbulenten runden Flüssigkeitsstrahl, welcher in die Umgebung ruhender Luft eingebracht wird und zerfällt. Die physikalischen Parameter sind auf für Dieselmotoren typische Betriebsbedingungen abgestimmt. Bianchi et al. [4], de Villers et al. [7] und Ishimoto et al. [37] verwenden dabei den für VoF-Methoden charakteristischen Volumenanteil als Indikatorfunktion und verwenden ein Feinstrukturmodell in ihren Simulationen. Daher stellen diese Simulationen keine DNS im gesamten Rechenggebiet dar, sondern verwenden einen einphasigen LES-Formalismus, welcher auf das gesamte zweiphasige Strömungsgebiet angewandt wird. Dabei werden alle durch die Filterung entstehenden Feinstrukturterme, welche in Verbindung zur Phasengrenze stehen, bei der Formulierung nicht berücksichtigt und es wird angenommen, dass die Gitterauflösung im Bereich der Phasengrenze den Einfluss dieser Terme sehr klein hält.

Desjardin et al. [10] hingegen führen eine DNS durch und verwenden für den Transport der Phasengrenze die CLS⁴-Methode, siehe [57], [58]. Bei der CLS-Methode handelt es sich um eine Umformulierung der klassischen Level-Set-Methode, welche dadurch verbesserte Massenerhaltungseigenschaften aufweist, indem anstatt der Abstandsfunktion ein hyperbolisches Tangentenprofil als Indikatorfunktion herangezogen wird. Diese Methode koppeln Desjardins et al. in [10] und [11] mit einem speziellen Verfahren zur Abbildung der Oberflächenspannung, der Ghost-Fluid-Methode [18]. Neben der CLS-Methode sind weitere Verfahren entwickelt worden, mit dem Ziel, die mit VoF bzw. Level Set verbundenen Nachteile zu reduzieren. Zu nennen sind Kopplungen zwischen der Level-Set- und VoF-Methode, siehe [54], [83], [85], [88] und Level-Set-Methoden mit einer verfeinerten Auflösung ausschließlich für die Level-Set-Variable wie z.B. die

⁴ Conservative Level Set

RLSG⁵-Methode nach Herrmann [27], [41] und die SRI⁶-Methode von Desjardins und Pitsch [9], worin auch bereits genannte Methoden diskutiert werden. Andere Arbeiten wiederum befassen sich mit einer adaptiven Gitterverfeinerung, wobei alle Variablen auf dem verfeinerten Gitter zu berechnen sind, eine Methode, die dann sinnvoll erscheint, wenn die Strömungsverhältnisse es erlauben, Teilgebiete mit grober Gitterauflösung zu vernetzen, siehe [52]. Einen guten Überblick über Arbeiten auf dem Gebiet des Primärzerfalls bietet der Artikel von Gorokhovski und Herrmann [25].

Numerische Simulationen des Primärzerfalls eines senkrecht in eine gasförmige Querströmung injizierten Flüssigkeitsstrahls sind ebenfalls Gegenstand aktueller Forschungsarbeiten. Simulationen dieser Konfiguration im Euler-Lagrange-Kontext sind z.B. in [75] und [76] durchgeführt worden. Salewski und Fuchs [76] führen dabei die Gasphase betreffend eine LES durch und folgern aus ihren Ergebnissen, dass die Annahmen des Euler-Lagrange-Ansatzes für diese Konfiguration in bestimmten Gebieten der Strömung nicht angemessen sind. Die Annahme isolierter und sphärischer Tropfen kann in der Nähe der Düse und auch in düsenfernen Gebieten nicht aufrecht erhalten werden. Mit einem Interface-capturing-Ansatz ist diese Konfiguration von Pai et al. [61], [62] und von Herrmann [28], [29] untersucht worden. Pai et al. [61], [62] verwenden dabei die Level-Set-Modifikation SRI und geben am luftseitigen Einlass ein stationäres laminares Geschwindigkeitsprofil vor. Die Umgebungsbedingungen sind atmosphärisch und das Dichteverhältnis der beteiligten Fluide liegt mit einem Wert von Zehn im unteren Bereich. Die Größe der verwendeten Rechengitter ist sehr hoch und variiert zwischen 36 Millionen und 110 Millionen Gitterpunkten. Herrmann [28], [29] verwendet die RLSG-Methode und setzt ein Feinstrukturmodell zur Beschreibung der Turbulenz in den einphasigen Teilgebieten der Simulation ein. Kleine flüssige nahezu sphärische Strukturen werden in eine Lagrange-Beschreibungsweise überführt. Die numerischen Gitter variieren in ihrer Größe zwischen 8,7 Millionen und 110 Millionen Gitterpunkten. Auch hier sind die Umgebungsbedingungen atmosphärisch.

1.4 Gegenstand der Arbeit und Vorgehensweise

In dieser Arbeit wird zur detaillierten numerischen Simulation von flugtriebwerksrelevanten Zweiphasenströmungen der von OpenCFD [59] veröffentlichte CFD-Code OpenFOAM verwendet. Die Auswahl des genannten CFD-Codes beruht auf der Tatsache, dass es sich bei dem in diesem Code implementierten numerischen Verfahren zur Beschreibung der Zweiphasenströmung um ein VoF-basiertes Interface-capturing-

⁵ Refined Level Set Grid

⁶ Spectrally Refined Interface

Verfahren handelt, welches Berechnungen komplexer Geometrien auf unstrukturierten Gittern ermöglicht. Schwerpunkt der Arbeit ist, diese numerische Methode an Konfigurationen anzuwenden, welche für die Zerstäubung des Kraftstoffs in Flugtriebwerken relevant sind. Dadurch soll eine Aussage über die offene Fragestellung getroffen werden, ob die komplexen Vorgänge, die in Flugtriebwerken bei der Zerstäubung stattfinden, abgebildet werden können. Der Fokus liegt dabei auf dem Primärzerfall des flüssigen Kraftstoffs, dem Teilgebiet der Zerstäubung, welches experimentellen Untersuchungen kaum zugänglich ist. Dazu ergibt sich in dieser Arbeit folgende Vorgehensweise:

- In einem ersten Schritt wird untersucht, inwieweit das numerische Verfahren phasengrenzenspezifische physikalische Phänomene wiedergibt. Dazu wird die Methode anhand analytischer Testfälle verifiziert, welche dazu dienen die Advektion der Phasengrenze, Auftriebskräfte und den Einfluss der Oberflächenspannung bei verschiedenen Dichteverhältnissen zu überprüfen.
- Die Praxis bei der Kraftstoffzerstäubung in Flugtriebwerken zeigt, dass i.d.R. Düsen verwendet werden, die einen komplexen geometrischen Aufbau aufweisen und verschiedene Prozesse involviert sind, bis es zur Zerstäubung kommt. In sogenannten Airblast-Zerstäuber-Düsen entwickelt sich ein Kraftstofffilm, der angetrieben durch eine Luftströmung entlang einer Wand voranschreitet, bis er an der Zerstäuberkannte zerstäubt wird. Der Transportprozess entlang der Wand soll in dieser Arbeit ebenfalls simuliert werden und es soll anhand experimenteller Daten untersucht werden, ob der Prozess abbildbar ist.
- Ein weiterer Validierungstestfall ist die Simulation eines Kerosinstrahls, welcher bei erhöhtem Umgebungsdruck in eine senkrecht verlaufende Luftströmung eingebracht wird. Wie in Kapitel 1.1 beschrieben, handelt es sich hierbei um einen Zerstäubungsprozess, welcher relevant für den Einsatz von LPP-Brennkammern ist. Die Simulationsergebnisse werden mit experimentellen Daten verglichen und darüber hinaus wird überprüft, ob die Dynamik der Phasengrenze Übereinstimmungen mit phänomenologischen Theorien aufweist.
- Trotz stetig steigender Rechenleistung liegt die Simulation von Zerstäubungsprozessen in komplexen Airblast-Zerstäubern noch in weiter Ferne. In einem letzten Schritt soll anhand eines generischen Testfalls die Machbarkeit einer Vorgehensweise untersucht werden, die es ermöglichen soll, die Entstehung eines Sprays zu simulieren, ohne die gesamte Komplexität der Düse in einer Phasengrenzen auflösenden Simulation abbilden zu müssen.

1.5 Gliederung der Arbeit

In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung von ein- und zweiphasigen Strömungen vorgestellt. Ausgehend von der kontinuumsmechanischen Beschreibung einphasiger Strömungen wird das Phänomen der Turbulenz erläutert und Ansätze zu ihrer Beschreibung und Modellierung vorgestellt. Anschließend werden die Grundlagen unter Berücksichtigung der Phasengrenze auf zweiphasige Strömungen ausgedehnt.

Kapitel 3 widmet sich der numerischen Umsetzung der vorgestellten mathematischen Beschreibung im Kontext der Finiten-Volumen-Methode. Dazu wird auf die Diskretisierung räumlicher und zeitlicher Terme eingegangen und die Lösung des Gleichungssystems beschrieben.

In Kapitel 4 werden die analytischen Testfälle zur Code-Verifizierung beschrieben und die Ergebnisse vorgestellt.

In Kapitel 5 werden die Simulationsergebnisse flugtriebwerkspezifischer Konfigurationen gezeigt, zu denen experimentelle Daten vorliegen. Die simulierten Konfigurationen werden detailliert beschrieben und alle relevanten Informationen zum sogenannten *Preprocessing* gegeben.

Kapitel 6 befasst sich mit einem generischen Testfall über die Machbarkeit einer eingebetteten DNS, welche dazu dienen soll, die Tropfenentstehung in einem kleinstmöglichen Rechengebiet mit zuverlässigen Randbedingungen zu simulieren.

Kapitel 7 fasst die Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick.



2 Theoretische Grundlagen

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Phänomene des Phasenübergangs und chemischer Reaktionen nicht berücksichtigt. Darüber hinaus werden ausschließlich inkompressible, isotherme Newtonsche Fluide behandelt. Für jede einzelne Phase gilt die Annahme konstanter Dichte, was nicht für ein Gemisch zweier Phasen gilt.

2.1 Kontinuumsmechanische Grundgleichungen einphasiger Strömungen

Die Formulierung und Lösung strömungsmechanischer Probleme basiert auf der Kontinuumsannahme, welche besagt, dass die kleinste charakteristische Längenskala der Strömung deutlich größer als die mittlere freie Weglänge der Fluidmoleküle ist. Daher kann eine beliebige makroskopische, physikalische Fluideigenschaft als eine kontinuierliche Funktion $\phi(\mathbf{x}, t)$ in Raum und Zeit beschrieben werden.

Die materielle Ableitung der Größe ϕ beschreibt die zeitliche Änderung, der diese Größe unterliegt, wenn man ihr mit der Strömung folgt und ist definiert durch:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi, \quad (2.1)$$

wobei \mathbf{U} den Geschwindigkeitsvektor darstellt. Der Term $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ beschreibt die ortsgebundene zeitliche Änderung und der Term $(\mathbf{U} \cdot \nabla \phi)$ den konvektiven Anteil.

Bei inkompressiblen, isothermen Strömungen sind die mechanischen Prozesse von den thermodynamischen entkoppelt. Somit unterliegt die Energiebilanz in dieser Arbeit keiner expliziten Behandlung und es genügt, die Massenerhaltung, die Impuls- und die Drehimpulsbilanz aufzustellen. Die differentielle Form der Bilanzgleichungen lautet:

- Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0, \quad (2.2)$$

- Impulsbilanz (Cauchy'sche Bewegungsgleichung):

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2.3)$$

- Drehimpulsbilanz:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x} \times \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x} \times \mathbf{U})\mathbf{U}] = \rho(\mathbf{x} \times \mathbf{g}) + \mathbf{x} \times (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}). \quad (2.4)$$

Aus den Gleichungen (2.3) und (2.4) folgt, dass $\boldsymbol{\tau}$ ein symmetrischer Tensor ist:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^T. \quad (2.5)$$

Hierbei stehen:

- ρ für die Dichte,
- \mathbf{x} für den Ortsvektor,
- $\boldsymbol{\tau}$ für den Spannungstensor.

Zur Herleitung der Gleichungen (2.1) bis (2.5) und weiteren Details siehe Spurk [81]. Im aufgestellten Gleichungssystem muss der Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ definiert werden, dessen Formulierung fluidabhängig ist.

2.2 Newtonsches Materialgesetz und Inkompressibilität

Für ein Newtonsches Fluid wird, unter Ausnutzung der Stokesschen Hypothese, welche besagt, dass die Druckzähigkeit vernachlässigbar ist, folgende konstitutive Gleichung für den Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ verwendet:

- Das Newtonsche Materialgesetz:

$$\boldsymbol{\tau} = - \left(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{U} \right) \mathbf{I} + \mu \left[\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T \right]. \quad (2.6)$$

Hierbei stehen:

- p für den Druck in $\left(\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{m}} \right)$,
- μ für die dynamische Viskosität.

Mit dem Newtonschen Materialgesetz lässt sich folgendes Gleichungssystem für Newtonsche Fluide angeben:

- Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0, \quad (2.7)$$

- Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} - \nabla \left(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{U} \right) + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)] . \quad (2.8)$$

Unter bestimmten Annahmen lassen sich die Gleichungen vereinfachen. Allgemein gilt, dass die Dichte ρ eine Funktion von Druck und Temperatur ist. Für inkompressible Fluide wird angenommen, dass der Einfluss des Drucks auf die Dichteänderung vernachlässigbar ist und darüber hinaus gilt, dass die materielle Ableitung der Dichte für inkompressible Fluide Null ist:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \rho = 0. \quad (2.9)$$

Damit vereinfacht sich die Massenerhaltung für den inkompressiblen Fall zu:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \quad (2.10)$$

Ist die Strömung darüber hinaus isotherm und handelt es sich um einen Reinstoff oder ein homogenes Stoffgemisch, so liegt eine Strömung konstanter Dichte vor, das heißt in Gleichung (2.9) sind beide Terme Null. Für Strömungen konstanter Dichte vereinfachen sich die Navier-Stokes-Gleichungen zu:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \mathbf{U}) = \mathbf{g} - \nabla P + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}), \quad (2.11)$$

mit

- P als der kinematische Druck in $\left(\frac{m^2}{s^2} \right)$,
- ν als kinematische Viskosität.

Mit den Gleichungen (2.10) und (2.11) steht ein geschlossenes Gleichungssystem zur Berechnung einer inkompressiblen, einphasigen Strömung konstanter Dichte zur Verfügung.

Für eine inkompressible Strömung variabler Dichte lauten die Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)] . \quad (2.12)$$

Das Gleichungssystem bestehend aus (2.10) und (2.12) ist nicht geschlossen, da an dieser Stelle eine Gleichung für die Dichte fehlt. Die Formulierung (2.12) der Navier-Stokes-Gleichungen wird zur Beschreibung von Zweiphasenströmungen in den Kapiteln (2.5.2) und (2.5.3) wieder aufgegriffen, wo auch das vollständige geschlossene Gleichungssystem eingeführt wird.

2.3 Turbulenz

Einphasige Strömungen können in die Kategorien der laminaren, turbulenten und transitionellen Strömungen unterteilt werden. Sowohl in natürlichen als auch in technischen Strömungen sind nicht laminare Strömungsverhältnisse sondern turbulente die Regel [56]. Damit Turbulenz entstehen kann und sich erhält, muss es in der Strömung Scherung geben. Durch die Geschwindigkeitsgradienten liegt ein Energiedifferential vor, wodurch anfänglich kleine Störungen in der Strömung infolge von Instabilitätsmechanismen in großskalige Schwankungen resultieren, aus denen Wirbel (engl. *eddies*) hervorgehen. Dieser Vorgang wird möglich, wenn die Trägheitskräfte in der Strömung den auf Störungen dämpfend wirkenden Einfluss viskoser Kräfte übersteigen. Die Reynoldszahl stellt das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften dar:

$$\text{Re} = \frac{U_c L_c}{\nu}, \quad (2.13)$$

mit U_c als charakteristische Geschwindigkeit und L_c als charakteristisches Längenmaß.

Im Folgenden steht der Begriff Wirbel stellvertretend für turbulente Schwankungen in einer Strömung, die über ein Gebiet der Länge l miteinander korreliert sind. Turbulente Strömungen weisen sich unter anderem dadurch aus, dass sie einen großen Skalenbereich von Wirbeln unterschiedlicher Größe abdecken. Richardson [67] hat den Begriff der Energiekaskade eingeführt, eine Modellvorstellung vom Verhalten turbulenter Strömungen: Die großskaligen Wirbel einer Strömung sind instabil und zerfallen in kleinere Wirbel, dabei übertragen sie ihre turbulente kinetische Energie auf diese. Die kleineren Wirbel unterliegen ebenfalls einem Zerfallsprozess, aus dem noch kleinere Wirbel resultieren. Dieser Vorgang wiederholt sich und dabei wird die turbulente kinetische Energie zu immer kleineren Skalen transferiert. Erreichen die Wirbel eine genügend kleine Längenskala, findet kein weiterer Zerfallsprozess statt und durch die molekulare Viskosität dissipiert die turbulente kinetische Energie.

Fragen, die sich aus dieser Vorstellung ergeben, sind, wie die turbulente kinetische Energie innerhalb dieses Skalenspektrums verteilt ist und von welchen Parametern die physikalischen Prozesse in diesem Skalenspektrum abhängen. Kolmogorov [44] hat diese Fragen beantwortet und er hat darüber hinaus das Modell der Energiekaskade quantifiziert, d.h. er hat Angaben zur Größe der kleinsten turbulenten Skalen geben können. Anhand Abbildung 2.1, lassen sich die wichtigsten Aussagen aus Kolmogorovs Phänomenologischer Beschreibung erläutern. Dargestellt ist das idealisierte Energiespektrum der Turbulenz $E(\kappa)$ aufgetragen über der Wellenzahl κ , wie es sich bei hohen Reynoldszahlen einstellt. Es spiegelt auch die Vorstellung der Energiekaskade wider.

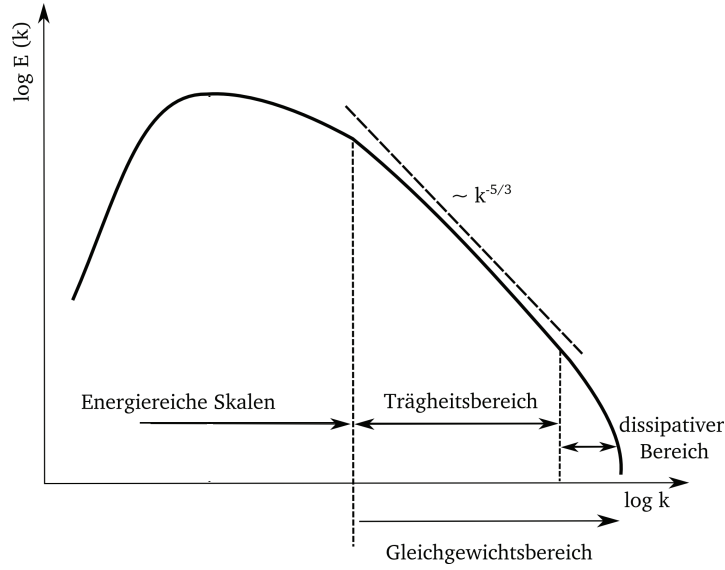


Abbildung 2.1: Energiespektrum einer turbulenten Strömung

Die energietragenden Skalen sind stark durch die Struktur der mittleren Strömung geprägt, von welcher sie die Energie beziehen. Die Wirbel in diesem Bereich sind von der makroskopischen Geometrie der Strömung abhängig und sind daher anisotrop. Der Einfluss der Viskosität auf diesen Bereich des Spektrums ist zu vernachlässigen. Mit steigenden Wellenzahlen nimmt der Grad an Isotropie zu. Die sich einstellende Isotropie bei kleiner werdenden Skalen wird auch als lokale Isotropie bezeichnet. Der Bereich lokaler Isotropie wird Gleichgewichtsbereich genannt und ist nur von der Dissipationsrate ε und der Viskosität abhängig. Der Gleichgewichtsbereich enthält immer noch viele Wirbel unterschiedlicher Größe. Viele Wirbel sind noch zu groß und die viskosen Kräfte somit zu klein, um Energie zu dissipieren. Daher lässt sich der Gleichgewichtsbereich in den Trägheitsbereich, welcher nur von der Dissipationsrate beeinflusst ist, und in den Dissipationsbereich, welcher von Viskosität und Dissipationsrate abhängt, unterteilen. Im Trägheitsbereich wird die Energie zu immer kleineren Wirbeln in den Dissipationsbereich transferiert. Dort sind die Wirbel klein genug und die Energie wird durch die Viskosität dissipiert. Aus der Dissipationsrate und der Viskosität ergeben sich die Kolmogorovsche Längenskala η , das dazugehörige Geschwindigkeitsmaß u_η und die Zeitskala τ_η :

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad u_\eta = (\varepsilon \nu)^{\frac{1}{4}} \quad \text{und} \quad \tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.14)$$

Mit der Abschätzung für die Dissipationsrate $\varepsilon \sim \frac{U_0^3}{l_0}$ lässt sich das Verhältnis der kleinsten zu den größten Skalen in einer ausgebildeten turbulenten Strömung angeben:

$$\frac{\eta}{l_0} \sim \text{Re}^{-\frac{3}{4}}, \quad \frac{u_\eta}{U_0} \sim \text{Re}^{-\frac{1}{4}} \quad \text{und} \quad \frac{\tau_\eta}{\tau_0} \sim \text{Re}^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.15)$$

wobei U_0 und l_0 die charakteristischen Größen der großen Skalen sind. Eine Abschätzung dieser Größen ist in [20] nachzuschlagen und eine detaillierte Betrachtung des Energiespektrums und von Kolmogorovs Hypothesen findet sich in [64].

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass das idealisierte Energiespektrum und die oben getroffenen Aussagen einerseits für eine Vielzahl von Strömungen Gültigkeit besitzen, andererseits ist dieses Verhalten jedoch nicht universell, da es nicht für jede turbulente Strömung zutrifft. Die erste Einschränkung ist die Annahme ausreichend hoher Reynolds-Zahlen, damit sich die Energiekaskade überhaupt bilden kann. Die Anwesenheit von Wänden stellt ebenfalls einen Fall dar, für den die Annahmen keine Gültigkeit besitzen, da durch die Scherschicht in Wandnähe turbulente energiereiche Strukturen entstehen, welche aber in ihrem Wachstum eingeschränkt sind. Dadurch kommt es zu energiereichen Wirbeln, die wesentlich kleiner sind, als Wirbel in einer wandfernen Scherschicht. Isotropie turbulenter Strukturen in Wandnähe liegt in der Regel selbst bei kleinen Skalen nicht vor. Als letztes sei angemerkt, dass die Energiekaskade den Transport turbulenter kinetischer Energie im Mittel beschreibt und es in realen Strömungen Mechanismen gibt, wodurch ein Rücktransport der Energie von kleinen Skalen zu größeren hin erfolgen kann, sogenannte Backscatter [6].

2.4 Modellierung und Simulation von Turbulenz

Komplexe turbulente Strömungen sind nicht analytisch lösbar, was bedeutet, dass zur Berechnung numerische Verfahren zum Einsatz kommen, in denen sowohl das Rechengebiet, als auch die Gleichungen aus Kapitel 2.2 in Raum und Zeit diskretisiert werden. Durch die Diskretisierung des Rechengebietes wird ein Gitter erzeugt, durch welches bestimmt wird, bis zu welchem Skalenbereich die Strömung aufgelöst wird. In der für strömungsmechanische Probleme i.d.R. verwendeten Finite-Volumen-Methode (FVM) wird vorausgesetzt, dass die Variablen linear zwischen benachbarten Gitterzellen variieren.

Direkte Numerische Simulation

Die direkteste Art eine turbulente Strömung zu berechnen - die Direkte Numerische Simulation (DNS)-, besteht darin, ein Gitter zu verwenden, welches das Kolmogorovsche Längenmaß auflöst. Da das instabile, Turbulenz erzeugende Verhalten von Strömungen den Navier-Stokes-Gleichungen inherent ist, können die bereits in Kapitel 2.2 eingeführten Gleichungen ohne Modifizierung numerisch gelöst werden. Durch die hohe Auflösung des Gitters entzieht der viskose Term in den Skalen des Dissipations-

bereichs dem System die turbulente kinetische Energie. Die Anzahl N_j je Raumrichtung j der zur Vernetzung notwendigen Gitterpunkte bei homogener Verteilung derselben skaliert dabei wie folgt:

$$N_j \sim \text{Re}^{\frac{3}{4}}. \quad (2.16)$$

Unter Berücksichtigung einer ausreichenden Anzahl von Zeitschritten lässt sich zeigen, dass der Rechenaufwand einer DNS mit der dritten Potenz der Reynolds-Zahl ansteigt. Daher bleibt die DNS beschränkt auf kleine Geometrien oder auf kleine Reynolds-Zahlen. Der hohe Rechenaufwand macht die DNS für Anwendungen im industriellen Alltag untauglich. Jedoch können die mit einer DNS erhaltenen Ergebnisse - unter der Voraussetzung minimierter numerischer Fehler - als exakt angesehen werden. Darüber hinaus können beliebige Größen im gesamten Rechengebiet ermittelt werden, weswegen man sie als numerisches Experiment betrachten kann. Notwendige moderne Labormesstechnik und der experimentelle Aufwand, die interessierenden Größen dreidimensional im Strömungsgebiet zu vermessen, zeigen, dass die DNS eine Alternative zu Experimenten sein kann. Dies ist um so mehr der Fall, wenn man den primären Strahlzerfall betrachtet. Ein Vorgang, der bei Zerstäubungsprozessen einer experimentellen detaillierten Untersuchung gar nicht zugänglich ist.

RANS

Sind die mittleren Strömungsgrößen als Ergebnis ausreichend, so können durch die Reynolds-Zerlegung der Variablen und einer anschließenden Mittelung die **Reynolds Average Navier-Stokes** (RANS) Gleichungen aufgestellt werden. Bei der Reynolds-Zerlegung einer Größe ϕ , wird diese in einen statistischen Mittelwert und in eine Schwankungsgröße aufgespalten:

$$\phi = \langle \phi \rangle + \phi' \quad (2.17)$$

und es gilt per Definition, dass der Mittelwert der Schwankungsgröße Null ist:

$$\langle \phi' \rangle = 0. \quad (2.18)$$

Die Mittelung kann in Form einer Ensemble-Mittelung oder einer zeitlichen Mittelung durchgeführt werden. Der Mittelwert bei der Ensemble-Mittelung ist definiert als Mittelwert über N Realisationen:

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \phi_m(\mathbf{x}, t). \quad (2.19)$$

Folgende Rechenregeln sind bei der Reynoldsmittelung gültig:

$$\langle \langle \phi \rangle \rangle = \langle \phi \rangle , \quad (2.20)$$

$$\langle \phi + \chi \rangle = \langle \phi \rangle + \langle \chi \rangle , \quad (2.21)$$

$$\langle \langle \phi \rangle \chi \rangle = \langle \phi \rangle \langle \chi \rangle , \quad (2.22)$$

$$\left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} , \quad (2.23)$$

$$\langle \nabla \phi \rangle = \nabla \langle \phi \rangle . \quad (2.24)$$

Wendet man die Reynoldsche Zerlegung auf die Variablen in der Kontinuitätsgleichung (2.10) und die Navier-Stokes-Gleichungen (2.11) an und mittelt anschließend die Gleichungen, ergibt sich:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{U} \rangle = 0 , \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \langle \mathbf{U} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{U} \rangle \langle \mathbf{U} \rangle) = \mathbf{g} - \nabla \langle P \rangle + \nabla \cdot (\nu \nabla \langle \mathbf{U} \rangle) - \nabla \cdot (\langle \mathbf{U}' \mathbf{U}' \rangle) . \quad (2.26)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.26) ist die Divergenz des Reynolds-Spannungstensors, welcher wie der Tensor der Reibungsspannungen ebenfalls symmetrisch ist: $\mathbf{U}' \mathbf{U}' = (\mathbf{U}' \mathbf{U}')^T$. Die Reynolds-Spannungen treten bei der Herleitung der Reynolds-Gleichungen aus dem nichtlinearen konvektiven Term hervor und repräsentieren den turbulenten Impulstransport. Dieser Term ist unbekannt und muss modelliert werden.

Das Gebiet der statistischen Turbulenzmodellierung ist sehr groß und eine vertiefte Betrachtung ist im Rahmen dieser Arbeit nicht zielführend. Das wohl bekannteste Turbulenzmodell ist das k - ε -Modell [40], welches zur Gruppe der Wirbelviskositätsmodelle gehört und eine Beziehung der turbulenten Viskosität zur turbulenten kinetischen Energie k und Dissipationsrate ε herstellt. Dazu muss jeweils eine Transportgleichung für k und ε gelöst werden.

Abschließend sei erwähnt, dass die RANS-Methode hinsichtlich der Turbulenzmodellierung eine Schwachstelle hat: Das Turbulenzmodell muss den Einfluss aller turbulenten Skalen auf das mittlere Strömungsfeld berücksichtigen. Wie in Kapitel 2.3 gezeigt,

dominieren auf unterschiedlichen Skalen verschiedene Vorgänge das turbulente Strömungsfeld, wobei die großskaligen Strukturen von der Geometrie der Strömung abhängen und in keiner Weise universellen Charakter haben. Daher ist nicht davon auszugehen, dass sich ein Turbulenzmodell für ein weites Spektrum sich stark unterscheidender Strömungen eignet, womit auch die Vielzahl bestehender Turbulenzmodelle zu erklären ist. Bei geeigneter Modellauswahl kann im RANS-Kontext der Rechenaufwand durch ein gröberes Gitter erheblich reduziert werden. Die Gitterpunkte müssen in diesen Fall derart im Rechengebiet verteilt werden, dass Gradienten der mittleren Strömung gut aufgelöst werden. Das heißt, dass Gitterpunktabstände so verteilt sein müssen, dass die Annahme der linearen Variation der Variablen akzeptabel ist.

Large-Eddy-Simulation

Die Large-Eddy-Simulation (LES) ist hinsichtlich des Rechen- und Modellierungsaufwandes zwischen der DNS und RANS einzuordnen. Das verwendete Gitter muss so fein gewählt werden, dass das aufgelöste Skalenspektrum - die Grobstruktur - bis in den Trägheitsbereich hineinreicht. Da das Gitter nicht alle Skalen auflöst, muss der Einfluss der nicht aufgelösten Skalen - die Feinstruktur - geeignet modelliert werden. Um zwischen Grob- und Feinstruktur zu unterscheiden, muss eine Skalentrennung stattfinden, welche prinzipiell einer Tiefpassfilterung entspricht. In der LES setzt sich eine Variable ϕ aus ihrem Grob- und Feinstrukturanteil zusammen:

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \overline{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t), \quad (2.27)$$

wobei der Grobstrukturanteil $\overline{\phi}$ durch die Filteroperation definiert ist:

$$\overline{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int \int \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*; \Delta) \phi(\mathbf{x}^*, t) d\mathbf{x}^*. \quad (2.28)$$

Durch die Filterfunktion G wird der zu verwendende Filter definiert und Δ ist die Filterweite. In der Regel dient bei der Berechnung von Strömungen in komplexen Geometrien die Diskretisierung des Rechengebietes in Kombination mit der FVM-Diskretisierung als Filter und die Skalen müssen somit nicht mehr durch eine explizite Filterung voneinander getrennt werden. Bei der Diskretisierung des Rechengebietes durch das Gitter wird die Filterweite Δ durch die Kontrollvolumina definiert und als Filterfunktion G dient der Top-Hat-Filter, oder auch Box-Filter genannt, siehe dazu [8] und [79]. Die Box-Filterung einer Variablen über ein Kontrollvolumen führt zu einer Mittelwertbildung derselben innerhalb des Kontrollvolumens. Da die FVM-Diskretisierung der Variablen über ein Kontrollvolumen zum selben Ergebnis führt, kann die explizite Filterung durch die FVM-Diskretisierung ersetzt werden.

Im Gegensatz zur Reynoldsschen Mittelwertbildung ist zu beachten, dass bei der Filterung Folgendes gilt:

$$\overline{\overline{\phi}} \neq \overline{\phi}, \quad (2.29)$$

$$\overline{\phi'} \neq 0, \quad (2.30)$$

$$\overline{\nabla \phi} \neq \nabla \overline{\phi}. \quad (2.31)$$

Für Gleichung (2.29) gilt im Falle des Cut-Off-Filters eine Ausnahme, da dieser Filter zu einer scharfen Trennung im Wellenzahlraum führt und in diesem Sonderfall die erneute Filterung eines gefilterten Signals das Signal nicht weiter verändert. Im Allgemeinen gilt auch, dass Filterung und Differentiation nicht vertauschbar sind. Bei der Herleitung der gefilterten Erhaltungsgleichungen wird dies jedoch i.d.R. vernachlässigt und man nimmt den dabei begangenen Fehler, den sogenannten Kommutationsfehler in Kauf. Ghosal und Moin [23] zeigen, dass für ein numerisches Verfahren zweiter Genauigkeitsordnung und einer Filterweite vergleichbar mit der Gitterzellenweite der Kommutationsfehler vernachlässigt werden kann, da er die Größenordnung des Abbruchfehlers besitzt.

Wendet man eine Filterung auf die Gleichungen (2.10) und (2.11) an und nimmt den Kommutationsfehler in Kauf, ergeben sich die gefilterten Gleichungen zu:

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{U}} = 0, \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{U}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{U}\mathbf{U}}) = \mathbf{g} - \nabla \overline{P} + \nabla \cdot (\nu \nabla \overline{\mathbf{U}}). \quad (2.33)$$

Um den Einfluss der Feinstruktur auf die Strömung nicht zu unterschlagen, wird die Zerlegung (2.27) in den konvektiven Term eingesetzt und ausmultipliziert. Der konvektive Term wird aufgespalten in den aufgelösten und nicht aufgelösten Anteil:

$$\overline{\mathbf{U}\mathbf{U}} = \overline{\mathbf{U}}\overline{\mathbf{U}} + \tau_{sgs}, \quad (2.34)$$

und Gleichung (2.33) ergibt sich zu:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{U}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{U}\mathbf{U}}) = \mathbf{g} - \nabla \overline{P} + \nabla \cdot (\nu \nabla \overline{\mathbf{U}}) - \nabla \cdot \tau_{sgs}. \quad (2.35)$$

Der Feinstruktur-Anteil τ_{sgs} muss modelliert werden, da er Prozesse auf Skalen beschreibt, die durch das Gitter nicht aufgelöst werden. Im Vergleich zur Modellierung der Reynolds-Spannungen im RANS-Kontext, ergeben sich jedoch für die Modellierung

der Feinstrukturspannungen erhebliche Vereinfachungen. Die zu modellierenden Effekte sind nun im Skalenbereich, für den eine gewisse Universalität angenommen werden kann, was zur Folge hat, dass Feinstrukturmodelle auf Strömungen unterschiedlicher Natur angewandt werden können und gleichzeitig einfacher zu gestalten sind. Hinzu kommt, dass sich der bei der Modellierung begangene Fehler nicht stark auf das Ergebnis auswirkt, da mit kleineren Skalen auch der Einfluss dieser auf die Strömung kleiner wird.

Im Folgenden wird nun auf die Modellierung des in Gleichung (2.35) zusätzlich auftretenden Terms eingegangen.

2.4.1 Feinstruktur-Modellierung

Allgemein gesprochen ist die Aufgabe eines Feinstrukturmodells, den Einfluss der Feinstrukturspannungen τ_{sgs} auf die Grobstruktur und den Transfer der turbulenten kinetischen Energie von den aufgelösten Skalen zu den nicht aufgelösten Skalen abzubilden. Dazu muss sichergestellt werden, dass die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie durch das Feinstrukturmodell gut abgebildet werden muss. Daher basieren viele Feinstrukturmodelle auf dem Wirbelviskositätsprinzip - auch bekannt als Boussinesq-Approximation.

Im Rahmen inkompressibler Strömungen stellt die Boussinesq-Approximation einen linearen Zusammenhang zwischen dem anisotropen Anteil der Feinstrukturspannungen und dem Deformationsgeschwindigkeitstensor \bar{S} der Grobstruktur, welcher durch

$$\bar{S} = \frac{1}{2} \left(\nabla \bar{U} + (\nabla \bar{U})^T \right) \quad (2.36)$$

gegeben ist, von folgender Form her:

$$\tau_{sgs} - \frac{1}{3} \text{tr}(\tau_{sgs}) \mathbf{I} = \tau_{sgs} - \frac{2}{3} k_{sgs} \mathbf{I} = -\nu_{sgs} \left(\nabla \bar{U} + (\nabla \bar{U})^T \right) = -2\nu_{sgs} \bar{S}, \quad (2.37)$$

mit ν_{sgs} als Wirbelviskosität und k_{sgs} als turbulente kinetische Energie der Feinstruktur. Die Aufspaltung des Feinstrukturspannungstensors in dessen isotropen und anisotropen Anteil ist bei inkompressiblen Fluiden aus Konsistenzgründen notwendig, da die Spur des Deformationsgeschwindigkeitstensors aufgrund der Kontinuitätsbedingung verschwindet, während für die Spur des Feinstrukturspannungstensors Folgendes gilt:

$$\text{tr}(\tau_{sgs}) = 2k_{sgs}. \quad (2.38)$$

Der isotrope Anteil $\frac{1}{3} \text{tr}(\tau_{sgs})$ wird zum gefilterten Druck \bar{P} beaufschlagt.

Wirbelviskositätsmodelle unterscheiden sich dahingehend, wie die Wirbelviskosität bestimmt wird.

Das Smagorinsky-Modell

Das Smagorinsky-Modell [80] verwendet folgenden Zusammenhang für die Wirbelviskosität:

$$\nu_{sgs} = (C_s \Delta)^2 |\bar{S}|, \quad (2.39)$$

mit dem Modellparameter, oder auch Smagorinsky-Konstanten C_s , der Filterweite Δ und mit

$$|\bar{S}| = (2\bar{S} : \bar{S})^{\frac{1}{2}}. \quad (2.40)$$

Für den Modellparameter C_s gibt es keinen eindeutig bestimmten Wert, sondern eher einen Wertebereich, je nach Art der zu berechnenden Strömung. Lilly [51] hat unter vereinfachenden Annahmen einen theoretischen Wert für C_s abgeleitet, welcher im Bereich $C_s \approx 0.165$ liegt. Breuer [6] gibt an, dass typische Werte, die sich in praktischen Anwendungen des Modells in Scherströmungen bewährt haben, im Bereich $C_s = 0.065 - 0.1$ liegen. Für den Modellparameter müssen häufig kleine Werte angesetzt werden, wenn die Strömung durch mittlere Gradienten geprägt ist. In diesem Fall kann das Smagorinsky-Modell nicht zwischen laminaren und turbulenten Gradienten unterscheiden und weist in jedem Fall eine hohe Dämpfung auf, was durch die Verkleinerung des Modellparameters abgemindert wird.

Wesentliche Annahmen, die dem Smagorinsky-Modell zugrunde liegen, sind die Annahme von Isotropie der kleinen Skalen und des lokalen Gleichgewichts zwischen Produktion und Dissipation der turbulenten kinetischen Energie.

Das Eingleichungsmodell nach Yoshizawa

Die vereinfachende Annahme des lokalen Gleichgewichts kann vermieden werden, wenn für eine turbulente Feinstrukturgröße, von welcher die turbulente Viskosität abhängt, eine Transportgleichung gelöst wird. Eine Größe, die sich dazu eignet, ist die turbulente kinetische Energie der Feinstruktur k_{sgs} , welche zur Bestimmung des charakteristischen Geschwindigkeitsmaßes der Feinstruktur dient.

Die Transportgleichung für k_{sgs} kann hergeleitet werden, indem die gefilterten Transportgleichungen von den nicht gefilterten abgezogen werden, wodurch man eine Transportgleichung für die fluktuierende Geschwindigkeit U' erhält. Multiplikation der Transportgleichung mit dem fluktuierenden Geschwindigkeitsvektor und anschließende Kontraktion führt auf die Transportgleichung für k_{sgs} , für eine detaillierte Darstellung

siehe [51]. Die exakte Transportgleichung für k_{sgs} enthält Terme, die modelliert werden müssen. Das Eingleichungsmodell nach Yoshizawa [91] ist folgendermaßen formuliert:

$$\frac{\partial k_{sgs}}{\partial t} + \nabla \cdot (k_{sgs} \bar{U}) = \nabla \cdot \left[(\nu + \nu_{sgs}) \nabla k_{sgs} \right] - \varepsilon - \nu_{sgs} \bar{S}^2. \quad (2.41)$$

Für die turbulente Viskosität und die Dissipation gilt:

$$\nu_{sgs} = \Delta C_k (k_{sgs})^{\frac{1}{2}}, \quad (2.42)$$

$$\varepsilon = \Delta C_\varepsilon (k_{sgs})^{\frac{3}{2}}, \quad (2.43)$$

mit den Modellkonstanten C_k und C_ε .

Dieses Modell hat im Vergleich zum Smagorinsky-Modell aufgrund der zusätzlichen Transportgleichung einen höheren Rechenaufwand, kann aber bestimmte Strömungserscheinungen erfassen, die das Smagorinsky-Modell nicht abbilden kann. Für den Sonderfall, dass die lokale Gleichgewichtsannahme gültig ist, sollten sich die Unterschiede zwischen den Modellen minimieren. Allgemein ausgedrückt, liefert das Eingleichungsmodell dann bessere Ergebnisse als das Smagorinsky-Modell, wenn die Strömungsverhältnisse vom lokalen Gleichgewichtszustand abweichen. Ein Vergleich unterschiedlicher Feinstrukturmodelle in Kanalströmungen ist in [21] zu sehen.

Sonstige Feinstrukturmodelle

Neben den zwei vorgestellten Modellen existiert eine Vielzahl weiterer Modelle. Ein ebenfalls bekannter Vertreter ist die dynamische Prozedur nach Germano et al. [22], welche es ermöglicht, die Modellkonstante eines Feinstrukturmodells in Abhängigkeit von lokalen Strömungsverhältnissen zu bestimmen. Ein Vorteil gegenüber den bereits genannten Modellen ist, dass in laminaren Bereichen kein Beitrag geliefert wird. An dieser Stelle sei für einen guten Überblick über die Feinstrukturmodellierung auf Sagaut [73], [74] verwiesen.

2.5 Beschreibung zweiphasiger Strömungen

Nachdem in den vorangegangenen Abschnitten die Grundlagen zur Beschreibung einphasiger Strömungen vorgestellt worden sind, werden nun die erforderlichen Erweiterungen aufgezeigt, welche notwendig sind, um eine Zweiphasenströmung zu beschreiben. Die Bezeichnung „Zweiphasenströmung“ deckt ein weites Gebiet sehr unterschiedlicher Strömungen ab. Eine grobe Unterteilung von Zweiphasenströmungen lässt sich

zum einen anhand der beteiligten Phasen und zum anderen anhand der Topologie der Phasengrenze vollziehen. Somit ergeben sich Klassifizierungen wie:

- Gas-Flüssigkeit-Gemisch,
- Gas-Feststoff-Gemisch,
- Flüssigkeit-Feststoff-Gemisch,
- Gemisch nicht mischbarer Flüssigkeiten.

Ein Gemisch nicht mischbarer Flüssigkeiten ist zwar keine Zweiphasenströmung, jedoch liegt aufgrund der Nicht-Mischbarkeit der Flüssigkeiten eine Grenzfläche vor, an der sich die Fluideigenschaften verändern, wodurch eine solche Strömung derselben mathematischen Behandlung wie Zweiphasenströmungen unterliegt. Klassifiziert man anhand der Topologie der Phasengrenze, werden Zweiphasenströmungen eingeteilt in:

- separierte Strömungen,
- transitionelle Strömungen,
- disperse Strömungen.

Im weiteren Verlauf werden Gas-Flüssigkeit-Gemische behandelt, da der Fokus der Arbeit auf Zerstäubungsprozessen liegt. Ein Zerstäubungsvorgang ist allgemein als transitionelle Strömung zu betrachten, da im düsennahen Bereich ein permanenter Flüssigkeitskern vorliegen kann, von welchem sich Ligamente und Tropfen abspalten und weiter stromab eine disperse Strömung - ein Spray - vorliegt.

Da in dieser Arbeit ein Phasengrenzen auflösendes Verfahren zum Einsatz kommt, müssen die geltenden Beziehungen an der Phasengrenze berücksichtigt werden. Diese werden im Folgenden aufgezeigt und anschließend werden verschiedene Phasengrenzen auflösende Verfahren vorgestellt und diskutiert.

2.5.1 Randbedingungen an der Phasengrenze

In den folgenden Gleichungen stehen die Indizes 1 und 2 für die jeweilige Phase und der Index i bezeichnet den Ort der Phasengrenze. An der Phasengrenze sind beide Phasen über eine kinematische und eine dynamische Bedingung miteinander gekoppelt. Für viskose Fluide bei Vernachlässigung von Phasenübergängen und molekularem Massentransfer lauten die Bedingungen wie folgt:

Kinematische Bedingung

$$\mathbf{U}_{1i} \cdot \mathbf{n}_{1i} = -\mathbf{U}_{2i} \cdot \mathbf{n}_{2i} = \mathbf{U}_{2i} \cdot \mathbf{n}_{1i} \quad (2.44)$$

Gleichung (2.44) besagt, dass die Geschwindigkeitskomponente normal zur Phasengrenze über die Phasengrenze hinweg kontinuierlich verläuft. Die Normalenvektoren \mathbf{n}_{1i} und \mathbf{n}_{2i} stehen senkrecht auf der Phasengrenze und zeigen von der jeweiligen Phase aus betrachtet in die Nachbarphase, $\mathbf{n}_{1i} = -\mathbf{n}_{2i}$. Handelt es sich bei beiden Phasen um viskose Fluide, so ist auch die Tangentialkomponente der Geschwindigkeit über die Phasengrenze hinweg kontinuierlich und somit ergibt sich ein kontinuierlicher Verlauf des Geschwindigkeitsfeldes bei Überschreiten der Phasengrenze: $\mathbf{U}_{1i} = \mathbf{U}_{2i}$.

Dynamische Bedingung

Die dynamische Randbedingung für eine konstante Oberflächenspannung σ lautet:

$$\begin{aligned} \left[\mu_1 \left(\nabla \mathbf{U}_1 + (\nabla \mathbf{U}_1)^T \right) \right]_i \cdot \mathbf{n}_{1i} - \left[\mu_2 \left(\nabla \mathbf{U}_2 + (\nabla \mathbf{U}_2)^T \right) \right]_i \cdot \mathbf{n}_{1i} \\ - (p_{1i} - p_{2i}) \mathbf{n}_{1i} = 2\zeta \sigma \mathbf{n}_{1i} \end{aligned} \quad (2.45)$$

und besagt, dass sich an der Phasengrenze der Druck und die Reibspannungen im Gleichgewicht mit der Oberflächenspannung befinden. Hierbei steht ζ für die mittlere Krümmung. Gleichung (2.45) kann noch in die normale und tangentiale Richtung aufgespalten werden:

$$\begin{aligned} \left[\mu_1 \left(\nabla \mathbf{U}_1 + (\nabla \mathbf{U}_1)^T \right) \right]_i : \mathbf{n}_{1i} \mathbf{n}_{1i} - \left[\mu_2 \left(\nabla \mathbf{U}_2 + (\nabla \mathbf{U}_2)^T \right) \right]_i : \mathbf{n}_{1i} \mathbf{n}_{1i} \\ - (p_{1i} - p_{2i}) = 2\zeta \sigma, \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\left[\mu_1 \left(\nabla \mathbf{U}_1 + (\nabla \mathbf{U}_1)^T \right) - \mu_2 \left(\nabla \mathbf{U}_2 + (\nabla \mathbf{U}_2)^T \right) \right]_i : \mathbf{n}_{1i} \mathbf{t}_i = 0. \quad (2.47)$$

In den Gleichungen (2.45) und (2.46) ist die mittlere Krümmung ζ wie folgt definiert:

$$\zeta = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right), \quad (2.48)$$

mit den zwei Hauptkrümmungsradien r_a und r_b .

2.5.2 Navier-Stokes-Gleichungen für Zweiphasenströmungen

Der Einfluss, den die Oberflächenspannung an der Phasengrenze auf die Strömung ausübt, muss in den Navier-Stokes-Gleichungen zur Beschreibung der Zweiphasenströmung berücksichtigt werden. Angeknüpft an die Herleitung der Gleichungen (2.10) und (2.12) aus Abschnitt 2.2 lauten die Kontinuitäts- und Impulsgleichung für die Zweiphasenströmung:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)] \\ + \int_{S_i(t)} \sigma \kappa \mathbf{n}_{1i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) dS, \end{aligned} \quad (2.50)$$

mit $\kappa = 2\zeta$ als Krümmung der Phasengrenze. Der letzte Term in Gleichung (2.50) repräsentiert die Kraft infolge der Oberflächenspannung. Wie erwähnt wirkt diese Kraft nur am Ort der Phasengrenze, was durch das Oberflächenintegral der Dirac-Funktion $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ entlang der Oberfläche der Phasengrenze $S_i(t)$ ausgedrückt ist. Die Gleichungen (2.49) und (2.50) sind für das gesamte Strömungsgebiet gültig. Der nächste Abschnitt beschreibt verschiedene Phasengrenzen auflösende Verfahren, welche zur Lösung dieser Gleichungen eingesetzt werden.

2.5.3 Phasengrenzen auflösende Verfahren

Die Herausforderungen Phasengrenzen auflösender Verfahren sind numerischer Natur und bestehen darin, die Phasengrenze zu lokalisieren und sie im diskretisierten Lösungsgebiet zu transportieren. Hinzu kommt der erschwerende Umstand, dass physikalische Größen wie z.B. Viskosität, Dichte und der Druck an der Phasengrenze eine sprungartige Änderung erfahren, da die Phasengrenze mathematisch als Diskontinuität beschrieben wird. In Zusammenhang mit der Diskontinuität muss auch die Kraft infolge der Oberflächenspannung geeignet abgebildet werden. Dazu muss zum einen die Dirac-Funktion diskretisiert und zum anderen die Krümmung der Phasengrenze genauestmöglich bestimmt werden. Die gängigsten Methoden, die Kraft infolge der Oberflächenspannung zu modellieren sind die *continuum surface force* Methode (CSF) [5], die *continuum surface stress* Methode (CSS) [45], [78] und die *ghost fluid* Methode (GF) [33], [54].

Um eine scharfe Darstellung der Phasengrenze bei der numerischen Behandlung zu erzielen und das Verschmieren der Phasengrenze zu vermeiden bzw. in Grenzen zu

halten, sind verschiedene spezielle Methoden entwickelt worden, von denen in diesem Kapitel die wichtigsten erläutert werden.

Level-Set-Methode

Die Level-Set-Methode, eingeführt von Sussman et al. [84], führt eine Abstandsfunktion ein, das sogenannte Level-Set-Skalar α . Die Funktion α ist so definiert, dass ihr Wert am jeweiligen Ort den Abstand zur Phasengrenze angibt. Alle Punkte, für die $\alpha = 0$ gilt, beschreiben den Ort der Phasengrenze S_i :

$$S_i = \{\mathbf{x} \mid \alpha(\mathbf{x}, t) = 0\}. \quad (2.51)$$

Zu betonen ist, dass α eine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion ist, das Vorzeichen ist abhängig von der am jeweiligen Ort vorhandenen Phase. Somit ist α eine kontinuierliche Funktion und man benötigt zur Diskretisierung der Transportgleichung für α keine speziellen Techniken. Der Transport der Phasengrenze wird durch eine Advektionsgleichung für α beschrieben:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \alpha = 0. \quad (2.52)$$

Bei inkompressibler Strömung lässt sich Gleichung (2.52) ebenfalls wie folgt formulieren:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) = 0. \quad (2.53)$$

Der Einheitsnormalenvektor \mathbf{n}_{1i} auf der Phasengrenze und die Krümmung κ können wie folgt ausgedrückt werden:

$$\mathbf{n}_{1i} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \Big|_{\alpha=0}, \quad (2.54)$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \Big|_{\alpha=0}. \quad (2.55)$$

Das Skalar α wird zu Beginn des Strömungsproblems als vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion initialisiert, aber nach Lösen der Gleichung (2.52) entspricht die Verteilung von α nicht mehr dieser Definition. Daher muss α nach jedem Zeitschritt reinitialisiert werden. Hinzu kommt, dass diese Methode nicht inherent konservativ ist und es bei starken Deformationen der Phasengrenze unter Umständen zu großen Massenverlusten kommen kann.

Front-Tracking-Methode

Die Front-Tracking-Methode [86] verfolgt die Phasengrenze, indem sogenannte Markerpartikel auf diese gesetzt werden, welche von der Strömung transportiert werden. Die Strömung wird auf einem nicht bewegten Gitter mit einem Finite-Volumen-Verfahren berechnet und die Advektionsgeschwindigkeit der Partikel wird vom Gitter auf die Position der Partikel interpoliert. Der Abstand benachbarter Markerpartikel kann durch starke Deformationen der Phasengrenze zu groß werden oder sehr klein werden, so dass in solchen Fällen Partikel hinzugefügt oder entnommen werden müssen, um eine adäquate Auflösung der Phasengrenze zu gewährleisten. Nach der Aktualisierung der Phasengrenzenposition wird die Oberflächenspannung berechnet und auf das feste Finite-Volumen-Gitter interpoliert. Die Dichte und Viskosität werden ebenfalls aktualisiert. Die Front-Tracking-Methode ermöglicht eine sehr genaue Berechnung der Phasengrenze und weist sehr gute Massenerhaltungseigenschaften auf, obwohl diese Methode nicht inherent massenerhaltend ist. Der Nachteil ist, dass Strömungen mit starken Topologieänderungen der Phasengrenze, wie z.B. Abschnürungen und Koaleszenz nicht automatisch berücksichtigt werden und der Aufwand dadurch in diesem Fall steigt.

Volume-of-Fluid-Methode

Die Bezeichnung Volume-of-Fluid-Methode (VoF) ist erstmals 1981 von Hirt und Nichols [32] verwendet worden. Seitdem dient die Bezeichnung VoF als Sammelbegriff für diverse Methoden, die sich zwar im Detail unterscheiden, jedoch eine Gemeinsamkeit haben, und zwar die zur Lokalisierung der Phasengrenze verwendete Indikatorfunktion, im Folgenden mit γ bezeichnet. Während bei der Level-Set-Methode die Indikatorfunktion als Abstandsfunktion α definiert ist, ist bei VoF-Methoden die Indikatorfunktion γ als Volumenfraktion definiert:

$$\gamma = \frac{V_k}{V_{KV}}. \quad (2.56)$$

Die Variable γ beschreibt den Volumenanteil, den die Phase k im jeweiligen Kontrollvolumen V_{KV} , im Folgenden nur V , einnimmt. So gilt beispielsweise:

$$\gamma = \begin{cases} 1 & \text{für ein Kontrollvolumen ausgefüllt mit Fluid 1,} \\ 0 < \gamma < 1 & \text{für ein Kontrollvolumen gefüllt mit beiden Fluiden,} \\ 0 & \text{für ein Kontrollvolumen ausgefüllt mit Fluid 2.} \end{cases} \quad (2.57)$$

Die zeitliche Entwicklung der Indikatorfunktion in einem inkompressiblen Strömungsfeld wird durch eine Advektionsgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma \mathbf{U}) = 0. \quad (2.58)$$

Die Dichte und die Viskosität in den Kontrollvolumen, welche von der Phasengrenze geschnitten werden und somit beide Fluide enthalten, ergeben sich aus:

$$\rho = \gamma \rho_1 + (1 - \gamma) \rho_2, \quad (2.59)$$

$$\mu = \gamma \mu_1 + (1 - \gamma) \mu_2. \quad (2.60)$$

Ein wichtiges Merkmal der Indikatorfunktion ist, dass diese keinen kontinuierlichen Verlauf aufweist, sondern einer Stufenfunktion, oder auch Heavysidefunktion, entspricht. Bei der numerischen Berechnung muss sichergestellt werden, dass der Übergang der Indikatorfunktion von Null auf Eins möglichst scharf erhalten bleibt und ein Verschmieren durch numerische Diffusion vermieden wird. Wie zuvor erwähnt, existiert eine Vielzahl an Methoden, die zeitliche Entwicklung der Indikatorfunktion numerisch umzusetzen.

Klassische VoF-Methoden verwenden einen geometrischen Ansatz zur Lösung der Advektionsgleichung (2.58). Dazu wird aus der diskreten Verteilung der Volumenfraktion der Verlauf der Phasengrenze geometrisch rekonstruiert, um anschließend die volumetrischen Flüsse über die Kontrollvolumen-Flächen zu ermitteln. Ein ausführlicher Überblick findet sich in [68], [78], [70]. Eine Alternative zu geometrisch basierten Verfahren sind algebraische Verfahren, welche auf die Rekonstruktion der Phasengrenze verzichten und zur Diskretisierung des konvektiven Terms in Gleichung (2.58) spezielle kompressive Diskretisierungsschemata verwenden, wodurch sie der numerischen Diffusion entgegenwirken, siehe dazu [87], [89]. Im Rahmen dieser Arbeit wird auf eine Rekonstruktion der Phasengrenze verzichtet, jedoch kommt kein kompressives Diskretisierungsschema zum Einsatz. Die verwendete Methode entspricht der Methode aus [72] und wird im Folgenden erläutert.

Um sowohl auf die Rekonstruktion der Phasengrenze, als auch auf kompressive Diskretisierungsschemata zu verzichten, wird ein zusätzlicher konvektiver Term in Gleichung (2.58) hinzugefügt:

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \gamma) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_r \gamma (1 - \gamma)) = 0. \quad (2.61)$$

Der letzte Term auf der linken Seite wird als künstlicher Kompressionsterm bezeichnet. Dieser Term ist aufgrund des Faktors $\gamma (1 - \gamma)$ nur im Bereich der Phasengrenze

aktiv und beeinflusst die Lösung nicht jenseits des Bereiches der Phasengrenze. Die Geschwindigkeit U_r muss so gewählt werden, dass sie der numerischen Diffusion entgegenwirkt und somit eine möglichst scharfe Phasengrenze erhalten bleibt. Auf die Bestimmung von U_r wird im anschließenden Kapitel eingegangen. Der Vorteil, der sich aus der Formulierung (2.61) ergibt, ist die Erhaltung des steilen Gradienten der Indikatorfunktion γ ohne geometrische Rekonstruktion der Phasengrenze.

Durch den Verzicht einer expliziten Rekonstruktion der Phasengrenze ist ihre exakte Position nicht bekannt. Die Indikatorfunktion verändert ihren Wert an der Phasengrenze nicht mehr sprunghaft, sondern weist an der Phasengrenze einen schmalen Transitionsbereich auf, in dem ein kontinuierlicher Verlauf der Indikatorfunktion von Null auf Eins erfolgt. Daher kann das Oberflächenintegral der Oberflächenspannung, siehe Gleichung (2.50), nicht direkt ermittelt werden. Stattdessen ermöglicht die CSF-Methode nach Brackbill et al. [5] eine Darstellung der Kraft infolge der Oberflächenspannung als Volumenkraft, welche im schmalen Transitionsbereich der Indikatorfunktion wirkt:

$$\int_{S_i(t)} \sigma \kappa \mathbf{n}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) dS \approx \sigma \kappa \nabla \gamma. \quad (2.62)$$

Die Krümmung κ der Phasengrenze wird ermittelt durch:

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \gamma}{|\nabla \gamma|} \right). \quad (2.63)$$

2.6 Zusammenfassung der Gleichungen

In diesem Kapitel sind die Grundlagen zur Modellierung und mathematischen Formulierung der im Rahmen dieser Arbeit zu behandelnden zweiphasigen Strömungsprobleme aufgezeigt worden. Bevor das mathematische Modell abschließend zusammengefasst wird, werden zwei Terme in der Impulsgleichung umformuliert, um eine vorteilhafte numerische Handhabung zu ermöglichen.

Der Hydrostatische Druck $\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$ wird vom Druck p abgezogen, somit lautet der in der Impulsgleichung modifizierte Druck p^* :

$$p^* = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \quad (2.64)$$

mit \mathbf{x} als Ortsvektor. Das Austauschen von p durch p^* in der Impulsgleichung muss bei der Gradientenbildung berücksichtigt werden:

$$\nabla p^* = \nabla p - \nabla (\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) = \nabla p - \rho \mathbf{g} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho. \quad (2.65)$$

Der Tensor der viskosen Spannungen wird ebenfalls umformuliert:

$$\nabla \cdot [\mu (\nabla U + (\nabla U)^T)] = \nabla \cdot (\mu \nabla U) + (\nabla U) \cdot \nabla \mu. \quad (2.66)$$

Somit lässt sich das mathematische Modell wie folgt zusammenfassen:

Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \cdot U = 0. \quad (2.67)$$

Impulsbilanz

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla p^* + \nabla \cdot (\mu \nabla U) + (\nabla U) \cdot \nabla \mu - g \cdot x \nabla \rho + \sigma \kappa \nabla \gamma. \quad (2.68)$$

Gleichung für die Volumenfraktion

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (U \gamma) + \nabla \cdot (U_r \gamma (1 - \gamma)) = 0. \quad (2.69)$$

Weitere Beziehungen

$$\rho = \gamma \rho_1 + (1 - \gamma) \rho_2, \quad (2.70)$$

$$\mu = \gamma \mu_1 + (1 - \gamma) \mu_2, \quad (2.71)$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \gamma}{|\nabla \gamma|} \right). \quad (2.72)$$

Eine Beziehung für die Geschwindigkeit U_r wird in der numerischen Behandlung in Kapitel 3.1 angegeben, da wie bereits erwähnt die Verwendung dieses Terms numerisch motiviert ist.

Feinstrukturmodellierung

Im Fall einer LES ist in der Impulsbilanz die molekulare Viskosität μ durch die effektive Viskosität zu ersetzen:

$$\mu_{eff} = \mu + \rho \nu_{sgs}, \quad (2.73)$$

wobei die Bestimmung der Wirbelviskosität ν_{sgs} vom verwendeten Feinstrukturmodell, wie in Kapitel 2.4.1 gezeigt, abhängt. Des weiteren sind in diesem Fall die verwendeten Gleichungen als gefiltert zu verstehen. Analog verhält es sich im Fall einer RANS.

Annahmen

Alle Untersuchungen behandeln ein Gas-Flüssigkeit-Gemisch, wobei für die beteiligten Phasen Folgendes gilt:

- jede einzelne Phase ist inkompressibel und hat eine konstante Dichte,
- für das Zweiphasengemisch liegt eine inkompressible Strömung mit variabler Dichte vor.

Zur Berechnung der Strömung kommt ein Phasengrenzen auflösendes Verfahren in Einzelfeldformulierung zum Einsatz, mit dem Volumenanteil als Indikatorfunktion. Die Annahmen dieser Modellformulierung sind:

- das numerische Gitter im Bereich der Phasengrenze ist fein genug, so dass
 - (a) die Krümmung der Phasengrenze gut aufgelöst ist,
 - (b) in Gitterzellen, die beide Phasen enthalten, keine Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen vorliegt.

Das Rechengebiet wird so vernetzt, dass Bereiche, in denen die Phasengrenze anzutreffen ist, hoch aufgelöst sind. Das übrige Gebiet weist nicht diese hohe Auflösung auf. Davon ausgehend ergibt sich für die Feinstrukturmodellierung, dass

- nicht geschlossene Terme, die durch die Filterung aus dem konvektiven Transport der Volumenfraktion und des Oberflächenspannungsterms hervorgehen, vernachlässigt werden, da die Phasengrenze ausreichend aufgelöst ist,
- die Feinstrukturspannungen als einzig zu schließender Term übrig bleiben und diese nur in einphasigen Regionen Einfluss haben.

Zur Feinstrukturmodellierung wird das Eingleichungsmodell nach Yoshizawa verwendet, für dieses gilt, dass

-
- Isotropie der Turbulenz angenommen wird,
 - Zustände, die vom lokalen Gleichgewicht der Turbulenz abweichen, abgebildet werden.



3 Numerische Beschreibung

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Finiten-Volumen-Methode, welche dazu dient, eine numerische Lösung der Strömung zu erhalten. Dazu wird das Strömungsgebiet in Kontrollvolumen eingeteilt und die Gleichungen werden diskretisiert.

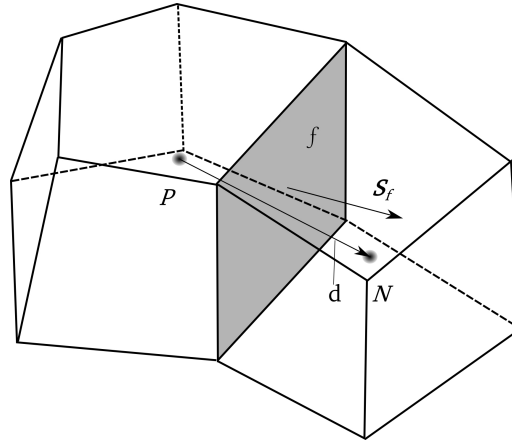


Abbildung 3.1: Kontrollvolumendarstellung (nach [60])

Abbildung 3.1 zeigt zwei aneinandergrenzende Kontrollvolumen (KV), an denen Begriffe, die im weiteren Verlauf verwendet werden, erläutert werden sollen. Die Punkte P und N repräsentieren die Mittelpunkte des jeweiligen Kontrollvolumens. Da zur Lösung eines Gleichungssystems Nachbarschaftsbeziehungen eine Rolle spielen, wird der Mittelpunkt des interessierenden KV's mit P und der eines benachbarten KV's mit N bezeichnet. Die Lage der Mittelpunkte ist so definiert, dass diese im Schwerpunkt eines KV's liegen:

$$\int_{V_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) dV = 0, \quad (3.1)$$

mit V_p als Volumen des betreffenden KV's und \mathbf{x} als Ortsvektor. Zwei Kontrollvolumen sind über eine KV-Fläche f miteinander verbunden, auf der Fläche f ist der Flächenvektor \mathbf{S}_f (im Folgenden nur noch \mathbf{S}) so definiert, dass er senkrecht auf f steht, raus aus dem betrachteten KV in das benachbarte KV hinein zeigt und sein Betrag entspricht der Fläche von f . Der Mittelpunkt der Fläche ist ebenfalls so definiert, dass dieser im Flächenschwerpunkt \mathbf{x}_f von f liegt:

$$\int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) dS = 0. \quad (3.2)$$

Der Vektor \mathbf{d} stellt die Verbindung der Punkte P und N dar, steht dieser senkrecht auf f , nennt sich das Gitter orthogonal. Wenn der Schnittpunkt zwischen \mathbf{d} und f nicht im Flächenschwerpunkt von f liegt, bezeichnet man das Gitter als schief.

3.1 Diskretisierung räumlicher Terme

Die Diskretisierung der räumlichen Terme wird anhand einer generischen Transportgleichung abgehandelt. Im Fall einer besonderen Behandlung spezieller Terme, wird an entsprechender Stelle im weiteren Verlauf darauf hingewiesen. Die Standardform einer Transportgleichung für eine Variable ϕ lautet:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) - \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) = S_\phi(\phi). \quad (3.3)$$

Von links nach rechts aufgezählt, setzt sich die Gleichung aus einem zeitlichen, einem konvektiven und einem diffusiven Term zusammen. Alle Terme, die eine andere Form haben, werden durch den Quellterm auf der rechten Seite ausgedrückt. Die Variable Γ_ϕ steht für einen Diffusionskoeffizienten. Im Rahmen der Finiten-Volumen-Methode muss die Gleichung (3.3) integriert über ein Kontrollvolumen V_P um den Punkt P erfüllt sein:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right) dt. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Das Gauss-Theorem wird angewandt, um Volumenintegrale räumlicher Ableitungen als Flächenintegrale auszudrücken:

$$\int_V \nabla \otimes \phi dV = \oint_{S_V} d\mathbf{S} \otimes \phi. \quad (3.5)$$

S_V ist die geschlossene Oberfläche, welche das Volumen V einschließt und $d\mathbf{S}$ ist der Flächenvektor eines infinitesimalen Flächenelementes, wobei $d\mathbf{S}$ aus dem Volumen rauszeigt. Der Operator \otimes steht stellvertretend für ein tensorielles Produkt, d.h. in Kombination mit der räumlichen Ableitung für die Divergenz, den Gradienten oder für die Rotation der Größe ϕ .

Da ein Kontrollvolumen von einer bestimmten Anzahl flacher Flächen f eingeschlossen ist, kann der Ausdruck in Gleichung (3.5) weiter formuliert werden:

$$\int_V \nabla \otimes \phi dV = \oint_{S_V} d\mathbf{S} \otimes \phi = \sum_f \left(\int_f d\mathbf{S} \otimes \phi \right). \quad (3.6)$$

Durch die Anwendung der Mittelpunktsregel lässt sich für das Flächenintegral innerhalb der Klammer in Gleichung (3.6) schreiben:

$$\int_f d\mathbf{S} \otimes \phi \approx \mathbf{S} \otimes \phi_f. \quad (3.7)$$

\mathbf{S} ist wie bereits erwähnt der Flächenvektor der zugehörigen Fläche f , über die integriert wird und zeigt aus dem jeweiligen Kontrollvolumen hinaus. Der Betrag von \mathbf{S} entspricht dem Flächeninhalt von f . Der tiefgestellte Index f deutet an, dass der entsprechende Ausdruck auf der jeweiligen Fläche des Kontrollvolumens zu verwenden ist. Dazu muss durch Interpolation der bekannten Werte auf den Kontrollvolumenzentren der Wert auf der Fläche interpoliert werden. Auf mögliche Interpolationen wird im nächsten Unterabschnitt eingegangen.

Interpolation auf KV-Flächen

Es existiert eine Vielzahl an Interpolationsmethoden, u.a. auch, weil im Rahmen der FVM die Interpolation von Werten auf KV-Mittelpunkten auf KV-Flächen sehr häufig angewandt wird und hohen Einfluss auf die Genauigkeit hat. Eine detaillierte Untersuchung und Bewertung von Interpolationsmethoden ist in [39], [19] zu finden.

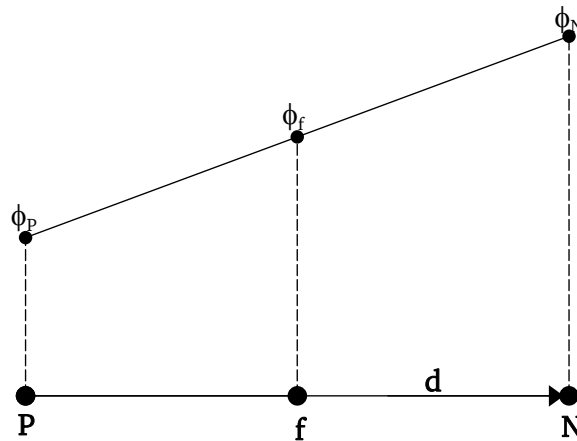


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung zur Interpolation (nach [39])

In Abbildung 3.2 ist schematisch der Verlauf der Variablen ϕ von Punkt P bis Punkt N dargestellt. Zur Interpolation auf den Wert ϕ_f kann folgende Vorschrift verwendet werden:

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N, \quad (3.8)$$

mit dem Interpolationsfaktor f_x , welcher als das Verhältnis der Abstände \overline{fN} und \overline{PN} definiert ist. Die Interpolation nach Gleichung (3.8) nennt sich Zentralsdifferenzen-

Verfahren und wird im Weiteren in Anlehnung an die englische Bezeichnung mit CD¹ abgekürzt und hat eine Genauigkeit zweiter Ordnung, selbst auf unstrukturierten Gittern [19]. Allerdings kann es bei der Verwendung von CD zu unphysikalischen Oszillationen kommen, so dass die Beschränktheit der Lösung nicht mehr gegeben ist [31], [63].

Eine alternative Interpolation, welche die Beschränktheit der Lösung garantiert, jedoch nur von erster Genauigkeitsordnung ist, ist das sogenannte *Upwind Differencing* (UD). Dabei wird ϕ_f abhängig von der Strömungsrichtung definiert:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & \text{für } F \geq 0, \\ \phi_N & \text{für } F < 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

F steht für den Massenfluss an der entsprechenden KV-Fläche. Der Vorteil der Beschränktheit wird durch den Verlust an Genauigkeit aufgezehrt, der führende Abbruchfehlerterm weist die Struktur eines diffusiven Terms auf, weshalb die Auswirkung des begangenen Fehlers als numerische Diffusion bezeichnet wird.

Es gibt eine Vielzahl von Interpolationsvorschriften, welche sogenannte *flux limiter* Formulierungen verwenden. Die Idee ist, ein Verfahren hoher und niedriger Ordnung - wie z.B. CD und UD - miteinander zu kombinieren und das Kriterium, welches Verfahren lokal verwendet wird, vom örtlichen Verlauf der Variablen abhängig zu machen. Eine ausführliche Behandlung solcher Verfahren ist in [39] nachzulesen.

Konvektiver Term

Die Diskretisierung des Konvektionsterms durch Ausnutzen der Beziehungen (3.6) und (3.7) ergibt:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV \approx \sum_f \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f \phi_f = \sum_f F \phi_f, \quad (3.10)$$

wobei F den Massenfluss durch die Fläche des Kontrollvolumens repräsentiert, $F = \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f$. Die Ermittlung der Massenflüsse im Rahmen der Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen wird im weiteren Verlauf behandelt. An dieser Stelle kann der Einfachheit halber angenommen werden, dass die entsprechenden Werte auf die Kontrollvolumenfläche interpoliert und miteinander multipliziert werden.

Gleichung (3.10) benötigt auch den Wert der Variablen ϕ auf der Kontrollvolumenfläche. Zur Interpolation können unterschiedliche Diskretisierungs-Schemata, wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt, verwendet werden.

¹ Central Differencing

Diffusiver Term

Die Diskretisierung des diffusiven Terms ergibt:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV \approx \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f . \quad (3.11)$$

Im Falle eines orthogonalen Gitters sind die Vektoren \mathbf{S} und \mathbf{d} parallel, siehe dazu Abbildung 3.1. In diesem Fall lässt sich der Ausdruck $\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f$ folgendermaßen formulieren:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\mathbf{S}| \cdot \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} . \quad (3.12)$$

Die Diskretisierung des Gradienten von ϕ nach Gleichung (3.12) hat nur auf orthogonalen Gittern eine Genauigkeit zweiter Ordnung. Damit keine Ordnungsreduktion auf nicht-orthogonalen Gittern stattfindet, kann der Gradient stattdessen im jeweiligen KV-Zentrum der angrenzenden Zellen ermittelt werden:

$$(\nabla \phi)_{PN} = \frac{1}{V_{PN}} \sum_f \mathbf{S}_f \phi_f \quad (3.13)$$

und anschließend auf die KV-Fläche interpoliert werden:

$$(\nabla \phi)_f = f_x (\nabla \phi)_P + (1 - f_x) (\nabla \phi)_N . \quad (3.14)$$

Die Diskretisierung des Gradienten von ϕ nach den Gleichungen (3.13) und (3.14) ist auch bei nicht-orthogonalen Gittern zweiter Ordnung genau, jedoch kann diese Diskretisierung - analog zu CD beim konvektiven Term - die Beschränktheit der Lösung aufheben. Hinzu kommt, dass der Abbruchfehler größer als bei Gleichung (3.12) ist [39]. Um den Vorteil des geringeren Abbruchfehlers von der Formulierung (3.12) weitestgehend zu nutzen, empfiehlt es sich nach [39], das Produkt $\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f$ in zwei Teile zu spalten:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = \underbrace{\Delta \cdot (\nabla \phi)_f}_{\text{orthogonaler Anteil}} + \underbrace{\mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f}_{\text{nicht-orthogonaler Anteil}} , \quad (3.15)$$

wobei für die beiden Vektoren Δ und \mathbf{k} folgende Bedingung erfüllt sein muss:

$$\mathbf{S} = \Delta + \mathbf{k} . \quad (3.16)$$

Der Vektor Δ repräsentiert den orthogonalen Anteil, weil er so gewählt ist, dass er parallel zu \mathbf{d} , siehe dazu Abbildung 3.1, d.h. der Verbindungslinie der KV-Zentren verläuft.

Jasak [39] hat verschiedene Verfahren zur Aufspaltung von \mathbf{S} in den orthogonalen und nicht-orthogonalen Anteil untersucht, für weitere Details zur Ermittlung von Δ und \mathbf{k} wird auf dessen Arbeit verwiesen.

Die diskretisierte Form des Ausdrucks $\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f$ lässt sich letztlich wie folgt ausdrücken:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \cdot \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f, \quad (3.17)$$

wobei $(\nabla \phi)_f$ nach Gleichung (3.14) zu ermitteln ist. Es sei abschließend erwähnt, dass durch die Verwendung der nicht-Orthogonalität-Korrektur die Beschränktheit der Lösung u.U. nicht mehr gegeben ist. Ist die Priorisierung der Beschränktheit sehr hoch, kann auf die Korrekturterme verzichtet werden, wodurch im Gegenzug die Genauigkeit sinkt. Bei der Diskretisierung wird der nicht-orthogonale Anteil explizit behandelt, um die Qualität der Matrix nicht zu senken und so das Konvergenzverhalten nicht negativ zu beeinflussen.

Quellterme

Quellterme, wie der Term $S(\phi)$ in Gleichung 3.3, können eine allgemeine Funktion von ϕ sein. Der Quellterm wird zunächst linearisiert:

$$S(\phi) = S_{expl} + S_{impl} \phi, \quad (3.18)$$

wobei S_{expl} und S_{impl} selbst von ϕ abhängig sein können. Die Diskretisierung von Quelltermen ergibt:

$$\int_{V_P} S(\phi) dV = S_{expl} V_P + S_{impl} \phi_P V_P. \quad (3.19)$$

Der Term S_{expl} wird ausschließlich explizit behandelt, d.h. er taucht im resultierenden Gleichungssystem auf der rechten Seite auf. Der Term S_{impl} wird je nach Vorzeichen implizit oder explizit behandelt. Gilt $S_{impl} < 0$, wird der Term implizit behandelt, da er die Diagonaldominanz der Matrix erhöht und so das Konvergenzverhalten verbessert. Im Fall $S_{impl} > 0$ wird dieser Term ebenfalls explizit behandelt.

Diskretisierung des Kompressionsterms

Um die Diskretisierung der räumlichen Terme abzuschließen, muss noch auf die Diskretisierung der Kompressionsgeschwindigkeit \mathbf{U}_r eingegangen werden. Die Anwendung des Gauss-Theorems und der Mittelpunktsregel auf den Kompressionsterm liefert:

$$\begin{aligned} \int_{V_p} \nabla \cdot (\mathbf{U}_r \gamma (1 - \gamma)) dV &\approx \sum_f \mathbf{S} \cdot (\mathbf{U}_r)_f (\gamma (1 - \gamma))_f = \sum_f \phi_r (\gamma (1 - \gamma))_f \\ &= \sum_f \phi_{rb} (\gamma)_f, \end{aligned} \quad (3.20)$$

und führt somit auf den Fluss $\phi_r = \mathbf{S} \cdot (\mathbf{U}_r)_f$ an KV-Flächen. Für ϕ_{rb} gilt $\phi_{rb} = \phi_r (1 - \gamma)_f$. Der Fluss ϕ_r wird wie folgt ermittelt:

$$\phi_r = \mathbf{n}^* \cdot \mathbf{S} \min \left(C_\gamma \frac{|\phi|}{|\mathbf{S}|}, \max \left(\frac{|\phi|}{|\mathbf{S}|} \right) \right), \quad (3.21)$$

mit dem Einheitsnormalenvektor der Phasengrenze \mathbf{n}^* :

$$\mathbf{n}^* = \frac{(\nabla \gamma)_f}{\left| (\nabla \gamma)_f \right| + \delta_s}. \quad (3.22)$$

Hierbei stehen ϕ für den volumetrischen Fluss, δ_s dient zur Stabilisierung des numerischen Verfahrens in Regionen wo γ keinen Gradienten aufweist. C_γ ist ein Kontrollparameter, um die Intensität des Kompressionsterms zu steuern. Es sei erwähnt, dass es mehrere mögliche Formulierungen für ϕ_r gibt. In dieser Arbeit wird die vorgeschlagene Formulierung von OpenCFD [59] verwendet. Der Einfluss des Kompressionsterms kann mittels der Konstanten C_γ kontrolliert werden. Setzt man den Wert auf Null liefert der Kompressionsterm keinen Beitrag. In dieser Arbeit wird der Wert auf Eins gesetzt.

Der nach Gleichung (3.22) berechnete Einheitsnormalenvektor wird auch verwendet, um die Krümmung κ der Phasengrenze zu bestimmen:

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}^*. \quad (3.23)$$

3.2 Zeitdiskretisierung

In diesem Abschnitt wird die zeitliche Ableitung und die zeitliche Integration behandelt. Nach den bereits vorgestellten Diskretisierungen kann Gleichung (3.4) wie folgt formuliert werden:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_f F \phi_f - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{s} \cdot (\nabla \phi)_f \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} (S_{expl} V_P + S_{impl} \phi_P V_P) dt. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Crank-Nicholson

Bei der Zeitdiskretisierung nach dem Crank-Nicholson-Verfahren (CN) ergeben sich die zeitliche Ableitung und Integration aus:

$$\left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)_P = \frac{\rho_P^n \phi_P^n - \rho_P^{n-1} \phi_P^{n-1}}{\Delta t}, \quad (3.25)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(t) dt = \frac{1}{2} (\phi^{n-1} + \phi^n) \Delta t, \quad (3.26)$$

mit

$$\phi^n = \phi(t + \Delta t), \quad (3.27)$$

$$\phi^{n-1} = \phi(t). \quad (3.28)$$

Aus den Gleichungen (3.24, 3.25, 3.26) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\rho^n \phi^n - \rho^{n-1} \phi^{n-1}}{\Delta t} V_P + \frac{1}{2} \left[\sum_f F \phi_f^n \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{s} \cdot (\nabla \phi)_f^n \right] \\ + \frac{1}{2} \left[\sum_f F \phi_f^{n-1} \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{s} \cdot (\nabla \phi)_f^{n-1} \right] \\ = \frac{1}{2} [S_{expl} V_P + S_{impl} \phi_P^n V_P] + \frac{1}{2} [S_{expl} V_P + S_{impl} \phi_P^{n-1} V_P]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Die CN-Zeitdiskretisierung ist von zweiter Genauigkeitsordnung, garantiert aber nicht die Beschränktheit der Lösung. Wie in Gleichung (3.29) zu sehen, werden bei dem CN-Verfahren alle vorkommenden Werte auf KV-Flächen sowohl für den aktuellen, als auch für den neuen Zeitschritt verwendet. Eine häufig getroffene Annahme ist die Vernachlässigung der zeitlichen Variation der Werte auf den KV-Flächen [63], woraus sich unterschiedliche Zeitdiskretisierungs-Verfahren ableiten lassen.

Backward Differencing

Backward Differencing (BD) ist ein Verfahren, welches die zeitliche Variation der Werte auf KV-Flächen vernachlässigt, aber dennoch von zweiter Genauigkeitsordnung ist. Dazu werden zur Diskretisierung der zeitlichen Ableitung drei Zeitebenen verwendet:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^n = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^{n-1} + \frac{1}{2}\phi^{n-2}}{\Delta t}, \quad (3.30)$$

mit

$$\phi^{n-2} = \phi(t - \Delta t). \quad (3.31)$$

Die nach BD diskretisierte Transportgleichung lautet:

$$\begin{aligned} \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^{n-1} + \frac{1}{2}\phi^{n-2}}{\Delta t} V_P + \left[\sum_f F \phi_f^n - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{s} \cdot (\nabla \phi)_f^n \right] \\ = [S_{expl} V_P + S_{impl} \phi_P^n V_P] . \end{aligned} \quad (3.32)$$

BD ist zwar ebenfalls von zweiter Genauigkeitsordnung, jedoch ist aufgrund der Vernachlässigung der zeitlichen Variation von Werten auf KV-Flächen der Abbruchfehler größer als bei CN [39]. Der begangene Fehler äußert sich ähnlich wie bei UD für den konvektiven Term als zusätzliche Diffusion.

Da im Rahmen dieser Arbeit großer Wert auf die Beschränktheit der Lösung gelegt wird, kommt *Backward Differencing* zum Einsatz.

3.3 Gleichungssystem und Linearisierung

Die abgeschlossene Diskretisierung der generischen Transportgleichung (3.4), wie z.B. in Gleichung (3.32) dargestellt, führt auf jeweils eine lineare algebraische Gleichung für jedes Kontrollvolumen, welche in folgender allgemeiner Form für eine beliebige diskretisierte Transportgleichung - unabhängig von den Diskretisierungstechniken - darstellbar ist:

$$a_P \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = R_P. \quad (3.33)$$

Für das gesamte Rechengebiet, d.h. für alle Kontrollvolumen ergibt sich ein lineares algebraisches Gleichungssystem der allgemeinen Form:

$$[A] [\phi] = [R], \quad (3.34)$$

mit der quadratischen Matrix $[A]$, welche auf ihrer Diagonalen die Koeffizienten a_p enthält und sonst dünn besetzt mit den Koeffizienten a_N ist, im Folgenden Nebenkoeffizienten. Alle Einträge in $[A]$ resultieren aus implizit diskretisierten Termen. $[\phi]$ enthält als Spaltenvektor die zu lösende Variable und $[R]$ die explizit diskretisierten Terme. Die Matrix $[A]$ kann in zwei Matrizen $[D]$ und $[N]$ zerlegt werden, welche respektive nur die Diagonal- bzw. Nebenkoeffizienten enthält:

$$[A] = [D] + [N] . \quad (3.35)$$

Um die Ausführungen in Kapitel 3.4 kompakt darzustellen, werden an dieser Stelle bestimmte Operatoren und Bezeichnungen eingeführt. Ein beliebiges lineares Gleichungssystem der Form (3.34) wird durch \mathcal{A} abgekürzt:

$$\mathcal{A} := [A] [\phi] = [R] . \quad (3.36)$$

Folgende Operatoren können angewandt werden, um bestimmte Koeffizienten aus \mathcal{A} zu extrahieren:

$$\mathcal{A}_A = [A] , \quad (3.37)$$

$$\mathcal{A}_D = [D] , \quad (3.38)$$

$$\mathcal{A}_N = [N] , \quad (3.39)$$

$$\mathcal{A}_S = [R] . \quad (3.40)$$

Eine Näherungslösung von ϕ kann durch das Jacobi-Verfahren erzielt werden, wozu der Operator \mathcal{A}_H eingeführt wird:

$$\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_S - \mathcal{A}_N \phi , \quad (3.41)$$

und ϕ wie folgt angenähert werden kann:

$$\phi \approx \mathcal{A}_D^{-1} \mathcal{A}_H = \frac{\mathcal{A}_H}{\mathcal{A}_D} . \quad (3.42)$$

Die Inversion einer Matrix wird im weiteren Verlauf aus Darstellungsgründen durch eine Division dargestellt, wie in Gleichung (3.42) bereits geschehen.

Es sei abschließend erwähnt, dass die Diskretisierung der generischen Transportgleichung (3.4) auf ein lineares algebraisches Gleichungssystem geführt hat, im Falle der

Navier-Stokes-Gleichungen der konvektive Term in der Impulsbilanz jedoch quadratisch ist:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) dV \approx \sum_f \mathbf{s} \cdot (\rho \mathbf{U})_f \mathbf{U}_f = \sum_f F \mathbf{U}_f = \sum_f \rho_f \phi \mathbf{U}_f, \quad (3.43)$$

wobei im letzten Umformungsschritt der Massenfluss F als das Produkt aus Dichte ρ_f und volumetrischem Fluss ϕ dargestellt ist. Um ein nichtlineares Gleichungssystem bei der Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen zu vermeiden, wird der konvektive Term linearisiert, indem der aus dem vorherigen Zeitschritt bekannte volumetrische Fluss ϕ^{n-1} verwendet wird. Der volumetrische Fluss ϕ ist zwar als Skalarprodukt aus Geschwindigkeit und Flächenvektor $\phi = \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}$ darstellbar, wird jedoch zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen nicht auf diese Weise ermittelt, sondern ist das Resultat der Prozedur zur Druck-Geschwindigkeit-Kopplung, worauf im folgenden Kapitel eingegangen wird.

3.4 Druck-Geschwindigkeit-Kopplung

Charakteristisch für die numerische Berechnung inkompressibler Strömungen ist die Abwesenheit einer Gleichung für den Druck. Mit den Impulsgleichungen und der Kontinuitätsbedingung stehen zwar vier Gleichungen für die drei Geschwindigkeitskomponenten und den Druck zur Verfügung, allerdings stellt die Kontinuitätsgleichung nur eine kinematische Bedingung an das Geschwindigkeitsfeld und kann alleine nicht zur Bestimmung des Drucks verwendet werden. Da bei Strömungsproblemen das lineare Gleichungssystem in aller Regel nicht direkt gelöst wird, in welchem Fall die Kopplung der Gleichungen untereinander erhalten bliebe, sondern die Gleichungen sequenziell gelöst werden, muss sichergestellt werden, dass letztlich sowohl die Kontinuitäts- als auch die Impulsgleichungen erfüllt sind. Verfahren, die zu diesem Zweck eine Kopplung zwischen Druck und Geschwindigkeit herstellen, werden als Druckkorrekturverfahren bezeichnet. Das Verfahren zur Druck-Geschwindigkeit-Kopplung basiert in dieser Arbeit auf dem PISO-Verfahren nach [38] und wird im Folgenden erläutert.

Der Ausgangspunkt zur Herleitung einer Gleichung für den Druck und zur Erlangung eines daraus folgenden divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldes ist eine semidiskretisierte Form der Impulsgleichung:

$$\mathcal{A}_D \mathbf{U} = \mathcal{A}_H - \nabla p^* - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho + \sigma \kappa \nabla \gamma. \quad (3.44)$$

\mathcal{A} steht hierbei für das lineare Gleichungssystem, welches aus der Diskretisierung der Impulsgleichungen ohne Berücksichtigung der Oberflächenspannung, der Gravitation

und des Druckgradienten hervorgeht. Aus Gleichung (3.44) lässt sich für die Geschwindigkeit schreiben:

$$\mathbf{U} = \frac{\mathcal{A}_H}{\mathcal{A}_D} - \frac{\nabla p^*}{\mathcal{A}_D} - \frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho}{\mathcal{A}_D} + \frac{\sigma \kappa \nabla \gamma}{\mathcal{A}_D}. \quad (3.45)$$

Einen Ausdruck für die volumetrischen Flüsse ϕ an den KV-Flächen erhält man durch Interpolation von Gleichung (3.45) und skalarer Multiplikation mit dem Flächenvektor \mathbf{S} :

$$\phi = \phi^* - \frac{\mathbf{S} \cdot (\nabla p^*)_f}{(\mathcal{A}_D)_f}, \quad (3.46)$$

wobei mit ϕ^* eine erste Abschätzung der volumetrischen Flüsse vorgenommen wird:

$$\phi^* = \left(\frac{\mathcal{A}_H}{\mathcal{A}_D} \right)_f \cdot \mathbf{S} - \frac{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho)_f}{(\mathcal{A}_D)_f} \cdot \mathbf{S} + \frac{(\sigma \kappa \nabla \gamma)_f}{(\mathcal{A}_D)_f} \cdot \mathbf{S}. \quad (3.47)$$

Die nach Gleichung (3.47) abgeschätzten volumetrischen Flüsse erfüllen die Kontinuitätsbedingung

$$\sum_f \phi = 0 \quad (3.48)$$

nicht, da der Einfluss des Druckgradienten noch nicht berücksichtigt ist. Eine Korrektur der abgeschätzten volumetrischen Flüsse kann vorgenommen werden, indem Gleichung (3.46) in die Kontinuitätsgleichung (3.48) eingesetzt wird und dadurch eine Gleichung zur Bestimmung des Drucks entsteht:

$$\sum_f \left(\left(\frac{1}{\mathcal{A}_D} \right)_f \nabla p^* \right) = \sum_f \phi^*. \quad (3.49)$$

Einsetzen des nach Gleichung (3.49) errechneten Drucks in Gleichung (3.46) liefert volumetrische Flüsse ϕ , welche die Kontinuitätsbedingung erfüllen.

3.5 Randbedingungen

Zur Lösung eines Strömungsproblems ist die Vorgabe von Anfangs- und Randbedingungen notwendig. Anfangsbedingungen für eine instationäre Strömungsberechnung werden i.d.R. aus einer vorgeschalteten RANS bezogen. Es gibt eine Vielzahl an möglichen Randbedingungen. Numerisch bzw. mathematisch betrachtet lassen sich die meisten von ihnen in zwei Gruppen unterteilen:

-
- **Dirichlet**-Randbedingungen schreiben einen festen Wert auf dem Rand vor, den die jeweilige Variable dort annimmt.
 - **von Neumann**-Randbedingungen schreiben den Gradienten der Variablen in normaler Richtung zum Rand vor.

Die Wahl der zu verwendenden numerischen Randbedingung ist abhängig von der Variablen und dem physikalischen Einfluss des jeweiligen Randes im Strömungsgebiet. Im Folgenden wird auf die in dieser Arbeit grundsätzliche Behandlung auftretender Strömungsberandungen eingegangen, eine genauere Beschreibung findet sich in den jeweiligen Kapiteln, in denen die berechneten Strömungskonfigurationen vorgestellt werden.

Einstromrand

Das Geschwindigkeitsfeld und alle skalaren Größen bis auf den Druck werden an Einstromrändern durch eine Dirichlet-Randbedingung beschrieben. Für den Druck gilt am Einstromrand eine von Neumann-Randbedingung mit verschwindender Normalableitung.

Ausstromrand

Am Ausstromrand wird für alle Variablen mit Ausnahme des Drucks eine von Neumann-Randbedingung mit verschwindender Normalableitung vorgegeben. Die Druckrandbedingung wird durch eine Dirichlet-Randbedingung spezifiziert. Auf diese Weise kann sichergestellt werden, dass die Massenerhaltung global erfüllt ist. Im Fall von möglichen Rückstromgebieten in der Nähe des Ausstromrands kann eine Randbedingung verwendet werden, welche für jede einzelne KV-Fläche am Ausstromrand ermittelt, ob die Strömung an jener Stelle das Rechengebiet verlässt. Ist dies der Fall, wird wie bereits beschrieben verfahren. Für den Fall, dass die Strömung in das Rechengebiet strömt, vertauschen sich die Randbedingungen zwischen Geschwindigkeit- und Druckfeld. Der Geschwindigkeit wird an den betreffenden KV-Flächen der Wert Null aufgeprägt und für den Druck gilt dort eine verschwindende Normalableitung.

Feste Wände

Für die Geschwindigkeit gilt eine Dirichlet-Randbedingung unter Berücksichtigung der Haftbedingung und für den Druck und die Volumenfraktion eine von Neumann-Randbedingung mit verschwindender Normalableitung. Die Randbedingungen für tur-

bulente Größen hängen von der Gitterauflösung in wandnormaler Richtung und der daraus resultierenden Wandbehandlung ab.

Periodische Ränder

Weist die Strömung in eine bestimmte Raumrichtung homogenes Verhalten auf, bietet es sich an, den beteiligten Rändern eine Periodizität aufzuprägen. Dies bedeutet, dass die jeweiligen gegenüberliegenden KV-Flächen auf den periodischen Rändern trotz ihrer räumlichen Distanz bei der Diskretisierung als benachbart behandelt werden.

Symmetrische Ränder

Weist das Strömungsfeld bezüglich einer Ebene im Raum symmetrisches Verhalten auf, kann eine Symmetrierandbedingung aufgeprägt werden. Es gilt eine von Neumann-Randbedingung mit verschwindender Normalableitung mit der Zusatzbedingung, dass Symmetrieränder nicht durchströmt werden.

4 Analytische Testfälle zur Code-Verifizierung

In diesem Kapitel wird der CFD-Code OpenFOAM, welcher zur Strömungsberechnung in dieser Arbeit eingesetzt wird, anhand zweiphasiger Testfälle verifiziert. Die Verifizierungsrechnungen beziehen sich auf die Advektion der Phasengrenzfläche, auf die Kraft infolge Oberflächenspannung und auf die Abbildung von Auftriebskräften.

4.1 Testfälle für die Advektion

Die Testfälle für die Advektion bieten die Möglichkeit, zu überprüfen, ob das numerische Verfahren Schwierigkeiten mit der Advektion der Indikatorfunktion aufweist. Dabei ist es wichtig, dass die Lösung für die Indikatorfunktion beschränkt, d.h. nur Werte zwischen Null und Eins annimmt, das Verfahren konservativ und möglichst genau ist. Für die Angabe des prozentualen Fehlers E bei den Advektionstestfällen wird folgende Vorschrift verwendet:

$$E = \frac{\sum_{i,j} |\gamma_{i,j}^N - \gamma_{i,j}^A|}{\sum_{i,j} \gamma_{i,j}^0}, \quad (4.1)$$

wobei $\gamma_{i,j}^N$ für die berechnete Lösung nach N Zeitschritten, und $\gamma_{i,j}^A$ bzw. $\gamma_{i,j}^0$ für die analytische bzw. Anfangslösung stehen. Des Weiteren wird in den Advektionstestfällen für beide Fluide jeweils gleiche Dichte und Viskosität vorgegeben.

4.1.1 Rotation einer Kreisscheibe mit Schlitz

Bei diesem Testfall nach [92] handelt es sich um eine Starrkörperrotation einer Kreisscheibe mit Schlitz um eine externe Drehachse. Das zweidimensionale quadratische Rechengebiet ist äquidistant aufgeteilt in 200 x 200 Kontrollvolumen mit physikalischen Abmessungen von 4 x 4. Der Kreis hat einen Durchmesser von 48 Zellen und einen Schlitz von 8 x 36 Zellen. Der Mittelpunkt des Kreises liegt bei (2.0, 2.72) und

die Rotationsachse liegt im Zentrum des Rechengebietes. Das Geschwindigkeitsfeld ist gegeben durch:

$$u = -\Omega (y - y_0) , \quad v = \Omega (x - x_0) , \quad (4.2)$$

mit dem Ort des Rechengebietszentrums $(x_0, y_0) = (2.0, 2.0)$ und der Winkelgeschwindigkeit $\Omega = 0.3536 \text{ rad/s}$. Der Maximalwert der Geschwindigkeit im Rechengebiet weist einen Maximalwert von 1.0 auf. Da es sich um eine Starrkörperrotation handelt, muss der Kreis nach einer Umdrehung unverändert an seine Ausgangsposition zurückkehren. Abbildung 4.1 zeigt die Ausgangskonfiguration und das Ergebnis nach einer Rotation, die Courant-Zahl bei dieser Rechnung beträgt 0.25. Der nach Gleichung (4.1) definierte Fehler beträgt $E = 7.64\%$. Darüber hinaus sind die Massenerhaltung und die Beschränktheit der Lösung gewährleistet. Dieser Testfall wird von Verfahren, welche die Phasengrenze explizit rekonstruieren mit Genauigkeiten im Bereich zwischen $1\% < E < 2.5\%$ berechnet, siehe dazu [43] und [71].

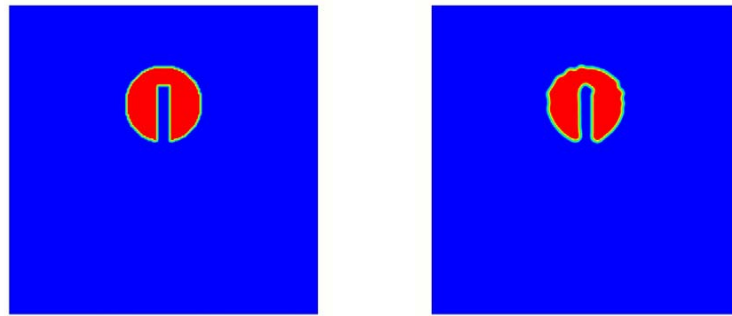


Abbildung 4.1: Starrkörperrotation einer Kreisscheibe mit Schlitz
Links: Ausgangsposition; Rechts: nach einer Rotation

4.1.2 Quadrat in einer Wirbelströmung

Dieser Testfall geht auf Rider und Kothe [69] zurück, welche angemerkt haben, dass bei einem Testfall zur Advektion einer Phasengrenze diese auch Topologieänderungen unterliegen sollte. Dazu wird ein Quadrat¹ einer Wirbelströmung ausgesetzt, wobei dieses durch Scherung deformiert wird. Das zweidimensionale Geschwindigkeitsfeld wird durch die Stromfunktion Ψ festgelegt [2]:

$$\Psi = \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y) , \quad (4.3)$$

¹ Obwohl die initialisierte Geometrie für den Testfall von sekundärer Bedeutung ist, sei angemerkt, dass in [69] von einem Kreis ausgegangen wird.

wobei für die Geschwindigkeitskomponenten folgender Zusammenhang gilt:

$$u = -\frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad v = \frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (4.4)$$

Das Quadrat wird diesem Geschwindigkeitsfeld N Zeitschritte ausgesetzt. Anschließend werden die Geschwindigkeiten invertiert und die Simulation läuft weitere N Zeitschritte. Bei fehlerfreier Diskretisierung müssen End- und Anfangszustand identisch sein. Das Rechengebiet ist für eine feine und eine grobe Rechnung äquidistant in 200×200 und 100×100 Kontrollvolumen aufgeteilt und seine physikalischen Abmessungen sind 1×1 . Das Quadrat hat eine Kantenlänge von 80 Zellen und sein Mittelpunkt liegt bei $(0.5, 0.75)$. Abbildung 4.2 zeigt für die Simulation auf dem feinen Gitter die Zeitschritte 0, N und $2N$. Die Courant-Zahl beträgt 0.25. Der Fehler bei dem feinen Gitter beträgt 4.06% und bei dem groben Gitter 7.76%. Massenerhaltung und Beschränktheit sind gewährleistet.

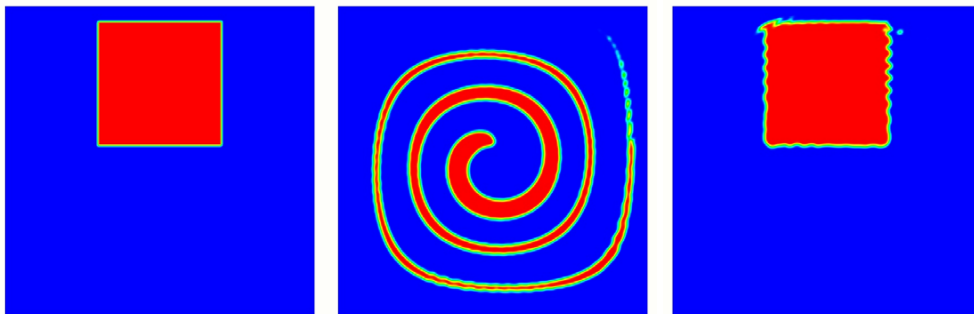


Abbildung 4.2: Quadrat in einer Wirbelströmung; Zeitschritte 0, 2400, 4800

4.2 Testfall für die Oberflächenspannung - Kapillarwellen

Ein Testfall für den Einfluss der Oberflächenspannung und veränderlicher Stoffwerte stellt die Simulation von Kapillarwellen dar. Wie in Abbildung 4.3 dargestellt, seien zwei Fluide zum Zeitpunkt $t = 0$ stabil übereinander geschichtet und die Phasengrenze sei cosinusförmig ausgelenkt. Aufgrund der Oberflächenspannung und Viskosität kommt es zu einer abklingenden Schwingungsbewegung der Phasengrenze. Unter der Voraussetzung kleiner Anfangsamplituden $a_0 = a(t = 0)$, unendlich ausgedehnter Fluide und gleicher kinematischer Viskosität beider Fluide lässt sich eine analytische Lösung für

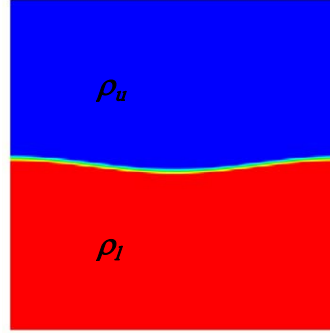


Abbildung 4.3: Cosinusförmige Auslenkung der Phasengrenze für den Testfall Kapillarwellen

das Abklingverhalten angeben. Sind die Fluide anfänglich in Ruhe, gilt für die zeitliche Entwicklung der Amplitude $a(t)$ nach [66]:

$$a(t) = \frac{4(1-4\beta)v^2k^4}{8(1-4\beta)v^2k^4 + \omega_0^2} a_0 \cdot \operatorname{erfc}\left(\sqrt{vk^2t}\right) + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - vk^2} \right) \cdot \exp\left[\left(z_i^2 - vk^2\right)t\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(z_i\sqrt{t}\right), \quad (4.5)$$

mit

$$\beta = \frac{\rho_u \rho_l}{(\rho_u + \rho_l)^2}, \quad \omega_0^2 = \frac{\sigma k^3}{\rho_u + \rho_l}$$

und mit k als Kreiswellenzahl, welche in diesem Testfall Eins beträgt. Die z_i sind die Lösungen der Gleichung:

$$z^4 - 4\beta\sqrt{k^2v}z^3 + 2(1-6\beta)k^2vz^2 + 4(1-3\beta)(k^2v)^{\frac{3}{2}}z + (1-4\beta)v^2k^4 + \omega_0^2 = 0, \quad (4.6)$$

und für Z_i gilt:

$$Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1), \quad (4.7)$$

Z_2 , Z_3 und Z_4 folgen analog aus einer zyklischen Permutation der Indizes.

Das Rechengebiet erstreckt sich über $2\pi \times 2\pi$ und die Gitterauflösung beträgt 128×128 . Es werden Simulationen für vier Dichteverhältnisse durchgeführt: $\rho_l/\rho_u = 1, 10, 100, 1000$. Die Anfangsamplitude a_0 beträgt 2% der Rechengebietshöhe. Weitere für die Simulation benötigte Parameter werden in Anlehnung an [26] wie folgt gewählt:

$$\frac{vk^2}{\omega_0} = \sqrt{\frac{4\pi}{3000}}, \quad \omega_0 = 1.$$

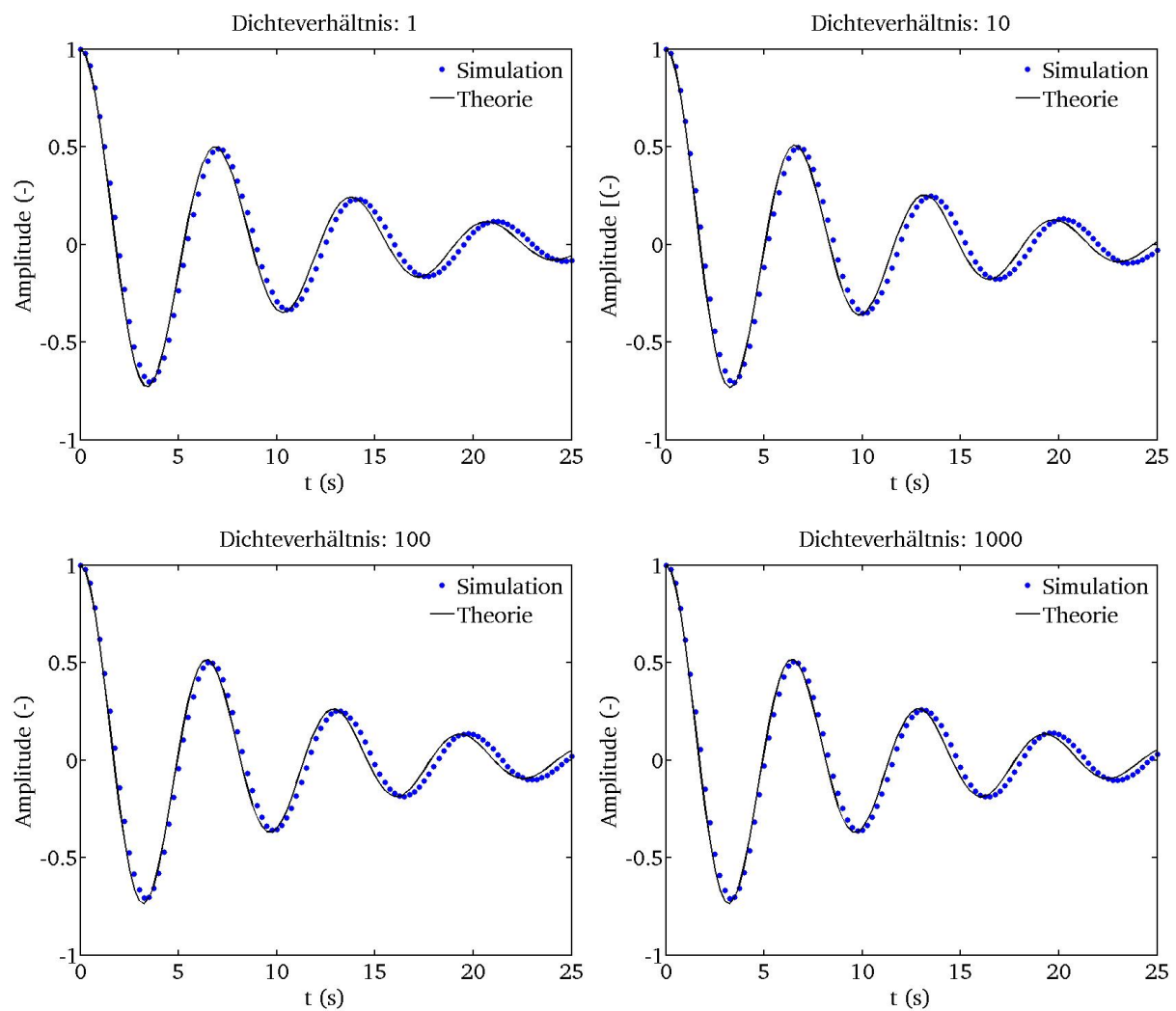


Abbildung 4.4: Vergleich des Abklingverhaltens zwischen Simulation und Theorie

Zur Bestimmung der analytischen Lösung sind die Gleichungen (4.5) und (4.6) mit einem Computeralgebra-System gelöst worden.

Abbildung 4.4 zeigt die Vergleiche zwischen der analytischen Lösung und den simulierten Ergebnissen für die vier berechneten Dichteverhältnisse. In Tabelle 4.1 ist der Fehler in Form der Standardabweichung zwischen Simulation und analytischer Lösung für die vier Dichteverhältnisse dargestellt.

Tabelle 4.1: Standardabweichung der Differenz zwischen Simulation und Theorie

ρ_l/ρ_u	1	10	100	1000
Fehler	0.0537	0.0574	0.0507	0.0473

4.3 Testfall für Auftriebskräfte - Rayleigh-Taylor-Instabilität

In diesem Testfall geht es darum, die Abbildung von Auftriebskräften zu überprüfen. Dazu betrachten wir wie im vorhergehenden Testfall eine Schichtung zweier Fluide mit cosinusförmiger Auslenkung der Phasengrenze, siehe Abbildung 4.5 links. Jedoch ist die Schichtung in diesem Fall instabil, d.h. $\rho_u > \rho_l$, so dass es zum Herabfallen des schweren Fluids in der Mitte und zum Aufsteigen des leichten Fluids an den Seiten des Rechengebietes kommt. Die Dimensionen des Rechengebietes betragen 1×4 und das Rechengitter hat eine Zellenanzahl von 64×256 . Die Amplitude der cosinusförmigen Anfangsauslenkung der Phasengrenze beträgt 0.05. Darüber hinaus gilt:

$$\frac{\rho_l}{\rho_u} = 0.1383, \quad \frac{\mu_l}{\mu_u} = 1, \quad g = 9.81.$$

In Abbildung 4.5 werden der Simulation die Ergebnisse von [65] gegenübergestellt, welche diesen Testfall mit einer Front-Tracking-Methode simuliert haben. Die Ergebnisse aus [65] sind in schwarzweiß dargestellt. Das in der Mitte des Rechengebietes

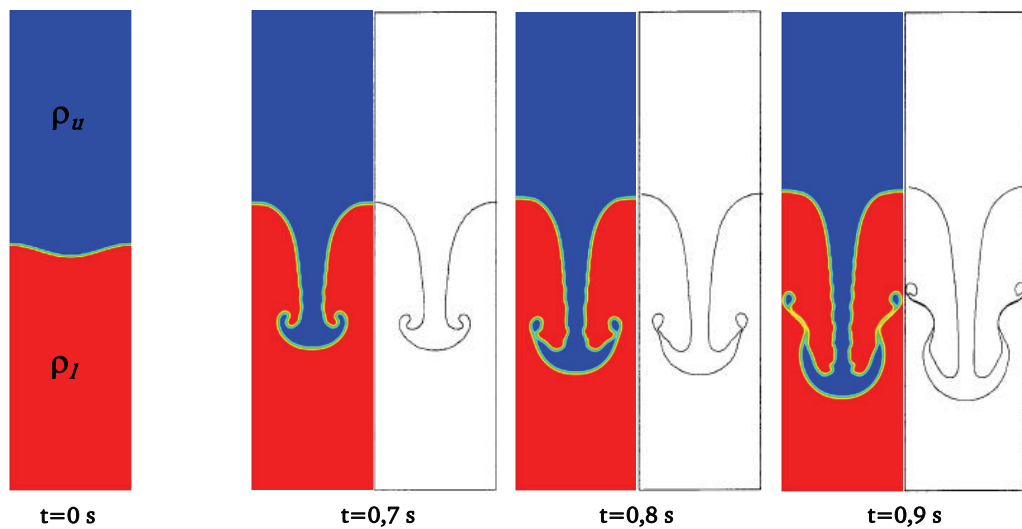


Abbildung 4.5: Ausgangszustand zur Simulation der Rayleigh-Taylor-Instabilität (links) und Vergleich mit den Ergebnissen von [65] zu drei Zeitpunkten.

absinkende schwere Fluid bildet den sogenannten Finger und an den Seiten bezeichnet man den Aufstieg des leichten Fluids als Blase. Der Vergleich mit den Referenzdaten zu verschiedenen Zeiten zeigt eine gute Übereinstimmung von Finger- und Blasenposition.

4.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel ist das Phasengrenzen auflösende Verfahren, welches in dieser Arbeit Verwendung findet, auf seine Genauigkeit untersucht worden. Dazu sind zweidimensionale Testfälle zur Überprüfung der

- Advektion der Phasengrenze,
- infolge der Oberflächenspannung wirkenden Kraft und
- Auftriebskräfte

gerechnet worden. Die Ergebnisse zeigen, dass die Vorhersagen in einem guten Genauigkeitsrahmen liegen. Der Vergleich der Ergebnisse mit denen anderer Phasengrenzen auflösender Verfahren, welche eine explizite Rekonstruktion der Phasengrenze durchführen, zeigt, dass letztere in bestimmten Fällen eine höhere Genauigkeit erzielen. Jedoch sei hier darauf hingewiesen, dass für die durchgeführten Testfälle einfache kartesische Gitter zum Einsatz kommen. Der Aufwand von Verfahren mit expliziter Rekonstruktion der Phasengrenze steigt sobald dreidimensional gerechnet wird und ist auf unstrukturierten Gittern, wie sie zur Vernetzung komplexer Geometrien zum Einsatz kommen, oftmals nicht möglich. Daher ist die Verwendung des vorliegenden Verfahrens von Vorteil, da im Folgenden komplexe Geometrien damit simuliert werden können.



5 Simulationen experimentell untersuchter Konfigurationen

In diesem Kapitel werden Simulationsergebnisse von Konfigurationen vorgestellt, zu denen experimentelle Daten zur Validierung vorliegen. Die Auswahl der Konfigurationen orientiert sich an Zweiphasenströmungen, wie sie in Zerstäubern von Flugtriebwerken vorkommen. In Airblastzerstäubern wird ein flüssiger Wandfilm entlang der filmtragenden Wand zur Abrisskante transportiert, an welcher es anschließend zur Zerstäubung des Kraftstoffs kommt. Den Kraftstofffilm und seinen Transport entlang der Wand zu beschreiben, ist für den nachfolgenden Zerstäubungsprozess von hoher Bedeutung, da die Eigenschaften des Wandfilms die nachgeschaltete Zerstäubung beeinflussen. In Hinblick auf das Ziel der vorgemischten Verbrennung in Flugtriebwerken ist das Zerstäubungskonzept des *liquid jet in crossflow* in den Fokus gerückt, da dadurch eine intensive Zerstäubung des Kraftstoffs und Vermischung mit der umgebenden Luft erzielt werden kann. Für triebwerksrelevante Anwendungen findet dieser Vorgang unter erhöhtem Umgebungsdruck statt. Daher wird auch der *liquid jet in crossflow* in diesem Kapitel untersucht. In den nächsten zwei Kapiteln werden die jeweiligen Konfigurationen vorgestellt, alle relevanten Informationen zum *preprocessing* gegeben und die Ergebnisse präsentiert.

5.1 Beschleunigte Filmströmung im ebenen Kanal

Bei der in diesem Kapitel numerisch untersuchten Konfiguration geht es um einen flüssigen Wandfilm, welcher durch eine Luftströmung in einem Kanal vorwärts getrieben wird. Experimentell und numerisch ist dieser Testfall von Ebner [15] und Ebner et al. [17] untersucht worden. Bei dem in den genannten Arbeiten verwendeten numerischen Modell werden Gas- und Flüssigphase separat mit verschiedenen Codes berechnet und durch die Wahl geeigneter Austauschparameter iterativ miteinander gekoppelt. So wird für die Gasphase ein CFD-code verwendet, welcher durch eine Erweiterung Wandrauigkeitseffekte in der Impulsbilanz berücksichtigt. Die Flüssigphase wird durch einen 2d Grenzschichtansatz beschrieben. Gekoppelt sind beide Module u. a. durch den Rauigkeitseffekt des Wandfilms auf die Gasphase und durch die Scherspannung an der

Phasengrenzfläche. Für eine detaillierte Beschreibung dieses Modells wird auf [16] verwiesen.

In dieser Arbeit werden die Messergebnisse dieser Konfiguration mit jenen des bereits vorgestellten Phasengrenzen auflösenden Verfahrens verglichen. Der Fokus bei dem Vergleich liegt auf der zeitlich gemittelten Filmhöhenverteilung entlang des Kanalbodens. Im Folgenden wird die Konfiguration beschrieben, für eine detaillierte Beschreibung der durchgeführten Experimente sei auf [15], [17] verwiesen.

5.1.1 Beschreibung der Konfiguration

In Abbildung 5.1 ist das Rechengebiet dargestellt. Die Rechnung wird zweidimensional in der $x - y$ -Ebene durchgeführt. Luft strömt entlang der x -Achse in den Kanal. Am Kanalboden, 50 mm nach dem Kanaleinstromrand, wird durch einen Spalt Flüssigkeit in den Kanal eingebracht, wodurch sich ein flüssiger Wandfilm entwickelt, welcher durch Scherkräfte an der Phasengrenze in x -Richtung vorwärts getrieben wird. Mit 30 mm Abstand nach dem Filmleger verengt sich der Kanalquerschnitt über eine Distanz von 34 mm, wodurch die Luftströmung eine Beschleunigung erfährt und sich die Ausbreitung des Wandfilms infolge dessen ebenfalls verändert. Die Verengung des Kanalquerschnitts ist durch zwei gleichmäßig ineinander übergehende Kreissegmente mit einem Radius von 19,5 mm gekennzeichnet und reduziert die Kanalhöhe von 41,5 mm um 20 mm auf 21,5 mm. In den experimentellen Untersuchungen dieses Testfalls [15], [17] ist die Kanalhöhe mit 40 mm und 20 mm vor bzw. nach dem Filmleger angegeben. Allerdings ist eine Vertiefung von 1,5 mm im Kanalboden, in welcher der Wandfilm eingebettet ist, bei diesen Maßangaben nicht berücksichtigt. Für die vorliegende Untersuchung wird dies berücksichtigt und die Kanalhöhe ist entsprechend angepasst. Die Breite des Spalts b_{spalt} , aus dem die Flüssigkeit in den Kanal tritt, ist frei zu $b_{\text{spalt}} = 650,25 \mu\text{m}$ gewählt und die Abstimmung des flüssigen Massenstromes

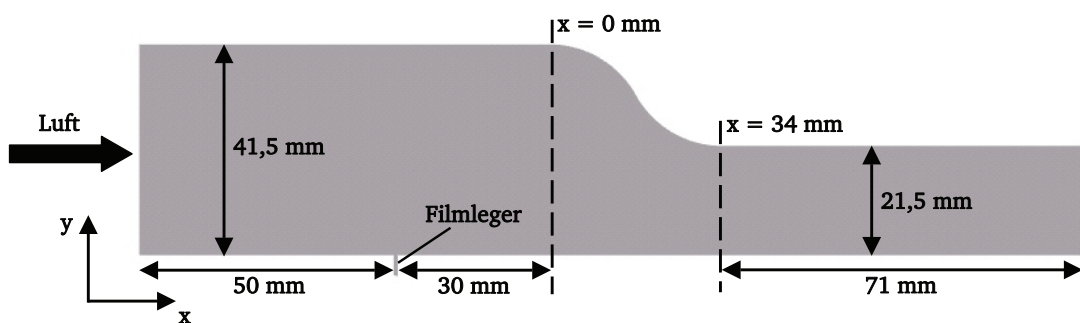


Abbildung 5.1: Geometrie des numerisch untersuchten Gebietes

mit den Werten aus dem Experiment erfolgt über eine Anpassung der Geschwindigkeit. Der Ausstromrand ist mit 71 mm nach Abschluss der Kanalverengung deutlich vom interessierenden Bereich des Rechengebietes entfernt.

Im Interesse der Untersuchung liegt die mittlere Filmdicke, die sich entlang der Kanalachse einstellen wird. Da sich die Geschwindigkeit der den Film vorantreibenden Gasphase entlang des Kanals erhöht, wird die Filmdicke in diesem Bereich abnehmen. Die Simulationsergebnisse werden Messwerten gegenübergestellt.

5.1.2 Betriebsparameter und Rechengitter

Bei den beteiligten Fluiden handelt es sich bei der Gasphase um Luft, den experimentellen Untersuchungen entsprechend, bei Umgebungsbedingungen und bei der Flüssigphase um ein synthetisches Öl (SHELLSOL D60 Öl), welches bei Raumtemperatur ähnliche Stoffeigenschaften aufweist, wie es bei Heizöl für flüssig befeuerte Gasturbinen bei Temperaturen von etwa 90° C der Fall ist. Tabelle 5.1 fasst alle relevanten Parameter zusammen. In Übereinstimmung mit den Betriebsbedingungen bei den Experimenten [17]

Tabelle 5.1: Simulationsparameter

Parameter		Einheit
σ	0,026	N/m
$U_{b,g}$	30	m/s
ρ_g	1,19	kg/m ³
ρ_l	781	kg/m ³
ν_g	$1,535 \times 10^{-5}$	m ² /s
ν_l	$1,5 \times 10^{-6}$	m ² /s
Λ	0,4	cm ² /s

beträgt die Geschwindigkeit der Gasphase, über die Fläche des Einstromrandes gemittelt, $U_{b,g} = 30 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und Dichte und Viskosität der Gasphase entsprechen den Werten, die bei einer Temperatur von $T = 293 \text{ K}$ und einer Dichte von $p = 1 \text{ bar}$ Gültigkeit besitzen. Die Stoffeigenschaften der flüssigen Phase und die Oberflächenspannung entsprechen den in [15] angegebenen Werten. Die Geschwindigkeit der flüssigen Phase $U_{b,l}$ am Einstromrand des Spaltes ergibt sich aus der angegebenen breitenbezogenen Filmbeladung $\Lambda = U_{b,l} b_{\text{spalt}}$. In der vorliegenden numerischen Untersuchung wird ein Betriebspunkt zur Simulation herangezogen, welcher durch die Filmbeladung $\Lambda = 0,4 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ festge-

legt ist, siehe Tabelle 5.1. Bei diesem Wert für die Filmbeladung ergibt sich für die Geschwindigkeit der flüssigen Phase am Spalteintritt der Wert $U_{b,l} = 0,0615 \frac{\text{m}}{\text{s}}$.

Abbildung 5.2 zeigt einen Teil der vernetzten Geometrie, in dem der Spalt im Kanalboden und die Kanalverengung zu sehen sind. Darüber hinaus ist das wandnahe Gebiet im Bereich des Spaltaustritts vergrößert dargestellt. In den Wandbereichen ist die Verdichtung der Gitterlinien zu erkennen, welche einerseits zur genauen Erfassung des flüssigen Wandfilms notwendig ist und zusätzlich die erforderliche Gitterauflösung in wandnormaler Richtung zur Verwendung eines Low-Reynolds Turbulenzmodells aufweist. Der lokal verfeinerte Kanalbodenbereich, in Abbildung 5.2 vergrößert dargestellt, hat bis zu einem Wandabstand von $600 \mu\text{m}$ eine Gitterauflösung von $10 \mu\text{m}$ in wandnormaler Richtung - bei den vier wandnächsten Gitterzellen sind es $5 \mu\text{m}$ - und $20 \mu\text{m}$ entlang der Kanalachse. Die in [17] experimentell ermittelte maximale mittlere

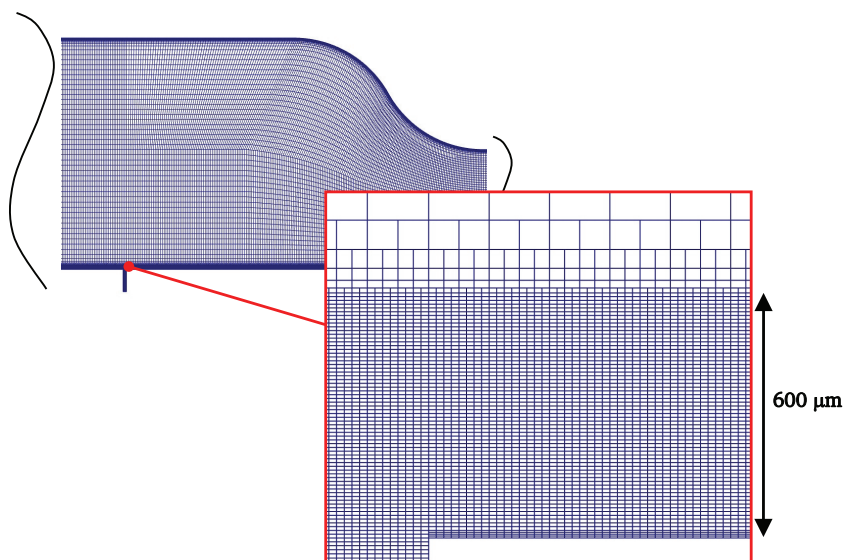


Abbildung 5.2: Gitterdarstellung im Bereich des Spaltes im Kanalboden und der Kanalverengung mit vergrößerter Darstellung im Bereich des Spaltaustritts

re Filmdicke für eine Filmbeladung von $\Lambda = 0,4 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ beträgt etwa $200 \mu\text{m}$, woraus geschlossen wird, dass die wandnormale Erstreckung der Gitterverfeinerung am Kanalboden ausreicht, um den flüssigen Wandfilm und die Grenzschicht der Gasphase an der Phasengrenze im verfeinerten Bereich zu erfassen. Die lokale Gitterverfeinerung entlang der oberen Wand erstreckt sich bis zu einem Wandabstand von $300 \mu\text{m}$, welcher in wandnormaler Richtung äquidistant mit 30 Kontrollvolumen aufgelöst ist. Das Rechengitter besteht aus etwa 450×10^3 Kontrollvolumen.

5.1.3 Randbedingungen und Simulationsparameter

Aufgrund der zweidimensionalen Behandlung dieses Testfalls, wird zur Simulation eine instationäre RANS durchgeführt. Als Turbulenzmodell dient das Low-Reynolds $k-\varepsilon$ Modell von Launder und Sharma [46], da die notwendige Gitterauflösung an der Wand zur Erfassung des flüssigen Wandfilms die Verwendung von Wandfunktionen nicht zulässt. Zu Beginn der Simulationen befindet sich keine Flüssigkeit im Kanal, d.h. die Entwicklung und Ausbreitung des Wandfilms wird vollständig berechnet und nach Ausbildung des Wandfilms mit der Ermittlung der Filmdicke begonnen. Folgende Randbedingungen werden vorgegeben:

Einstromrand Kanal

Wie in Kapitel 3.5 beschrieben, wird am Einlass für alle Größen, bis auf den Druck, eine Dirichlet-Randbedingung vorgegeben. Für die Geschwindigkeit wird ein ausgebildetes turbulentes Profil bei dem gewünschten Massenstrom vorgegeben, welches aus einer vorgeschalteten einphasigen RANS hervorgegangen ist. Das gleiche gilt für die Verteilung der turbulenten Größen k und ε am Einlass. Bei der vorgeschalteten RANS ist am Einlass ein Turbulenzgrad von 4,5 % angenommen worden. Die Volumenfraktion γ hat am Kanaleinlass den Wert Null.

Einstromrand Spalt

Die in den Spalt eintretende Flüssigkeit hat eine geringe Geschwindigkeit, so dass eine laminare Strömung vorliegt. Die Distanz zwischen Spaltein- und -austritt ist 4 mm und es wird für die Geschwindigkeit ein Blockprofil vorgegeben. Für k und ε wird ein sehr geringer von Null verschiedener Wert vorgegeben, um eine Division durch Null zu vermeiden. Für die Volumenfraktion gilt $\gamma = 1$.

Wände

An den Wänden gilt die Haftbedingung und es wird auf Kapitel 3.5 verwiesen. Für k und ε wird ein kleiner von Null verschiedener Wert vorgegeben.

Ausstromrand

Alle Größen, bis auf den Druck werden durch eine Nullgradienten-Randbedingung definiert. Der Druck wird am Ausstromrand mit dem Referenzwert Null belegt.

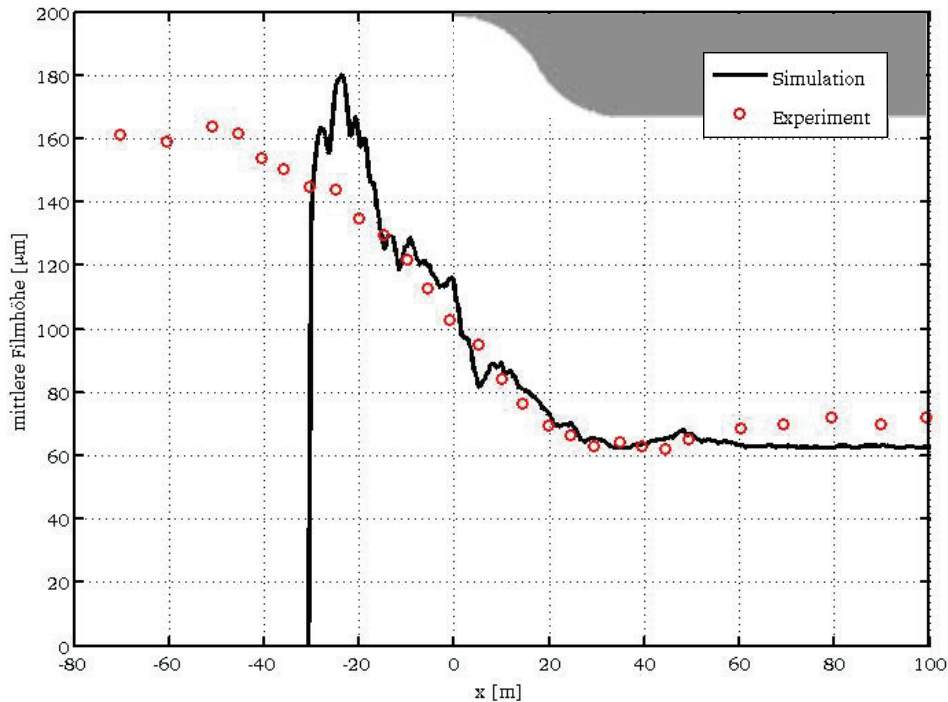


Abbildung 5.3: Mittlere Filmdickenverteilung, Simulation und Experiment

5.1.4 Ergebnisse

Abbildung 5.3 zeigt den Vergleich zwischen der berechneten mittleren Filmhöhenverteilung entlang des Kanalbodens und den experimentellen Referenzwerten. Zur Orientierungshilfe ist der Verlauf der oberen Kanalwand ab der Kanalverengung in der Darstellung mit aufgenommen.

Zur Ermittlung der Kurve aus Abbildung 5.3 ist die Volumenfraktion während der Simulation zeitlich gemittelt worden. Mit der Mittelung ist begonnen worden, nachdem der gesamte Kanalboden mit dem flüssigen Wandfilm bedeckt war. Die Mittelungsdauer betrug etwa 300 ms, etwa die gleiche Zeit benötigte der Wandfilm, um den Kanalboden vollständig zu bedecken. Aus dem gemittelten Feld der Volumenfraktion ist die Isolinie mit dem Wert $\gamma = 0,5$ extrahiert worden, woraus sich der in Abbildung 5.3 dargestellte Verlauf der mittleren Filmdicke ergibt.

Die Kurve in Abbildung 5.3 beginnt bei dem Wert Null und steigt rapide an. Der Grund dafür ist, dass die Filmdickenverteilung ab dem Spaltbeginn dargestellt ist und wird in Abbildung 5.4 veranschaulicht. Am Spaltaustritt liegt die Flüssigkeit am linken Spalttrand am Kanalboden an und steigt über die Spaltbreite hinweg an. Dieser Anstieg über die kurze Spaltbreite ist in Abbildung 5.3 nahezu als Sprung abgebildet.

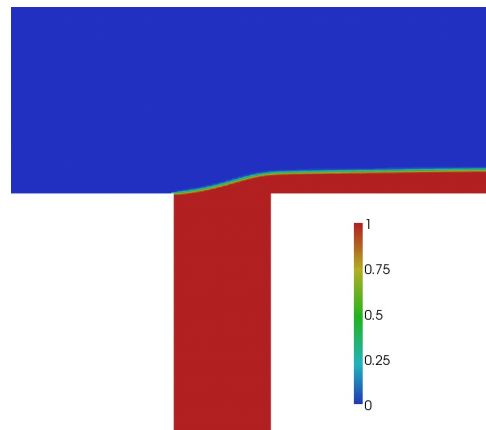


Abbildung 5.4: Darstellung der gemittelten Volumenfraktion am Spaltaustritt

Über eine Distanz von etwa 10 mm nach dem Spaltaustritt liegt die Filmhöhe sehr deutlich über den experimentellen Werten, vgl. Abbildung 5.3. Danach fällt die Überhöhung ab und etwa 15 mm nach dem Spaltaustritt nähern sich die simulierten Werte den experimentellen an. Der Grund für die Abweichungen in diesem Bereich ist auf den Spaltaustritt zurückzuführen. Bei der experimentellen Untersuchung lag der Spaltaustritt deutlich stromaufwärts, so dass an der Position 30 mm vor der Kanalverengung der Wandfilm längst ausgebildet war. Auf ein derart langes Rechengebiet ist hier verzichtet worden, so dass der Einfluss des nicht ausgebildeten Wandfilms an dieser Stelle zu erkennen ist. Nachdem der störende Einfluss abgeklungen ist, weist die Simulation über die gesamte Kanalverengung eine gute Übereinstimmung mit den Referenzwerten auf. Nach Abschluss der Kanalverengung unterschätzt die Simulation jedoch die Filmhöhe im Vergleich zum Experiment. Eine abgesicherte Begründung für diese Abweichung kann an dieser Stelle nicht genannt werden, jedoch liegt es nahe, die Abweichungen auf einen fehlerhaften Impulsaustausch zwischen Gas- und Flüssigphase zurückzuführen. In diesem Zusammenhang wäre der Einfluss der Turbulenzmodellierung auf die Dynamik der Phasengrenze zu untersuchen.

Zusammenfassend weist die Simulation stellenweise eine sehr gute Übereinstimmung mit den Referenzdaten auf. Trotz des Einflusses des Spaltaustritts nähert sich die Simulation den experimentellen Werten noch vor der Kanalverengung sehr gut an und gibt den Verlauf der Filmdicke über die gesamte Verengung wieder. Der teilweise sehr kantige Verlauf der Kurve kann möglicherweise durch eine Verlängerung der Mitteldauer geglättet werden.

5.2 Large-Eddy-Simulation eines Kerosin-Jets in einer Querströmung

Die Einspritzung eines Flüssigkeitsstrahls in eine quer dazu verlaufende Gasströmung (LJCF¹) ist eine Konfiguration mit Relevanz für Anwendungen wie z.B. LPP-Brennkammern, Nachbrennern in Flugtriebwerken und Staustrahltriebwerken. Die Favorisierung des LJCF als Zerstäubungskonzept für die genannten Anwendungen liegt darin begründet, dass dieses Konzept ein hohes Potential bietet, den Kraftstoff effizient zu zerstäuben und dadurch eine hohe Verdampfungsrate und ein möglichst homogenes Luft-Kraftstoff-Gemisch erzielen zu können. Zur Realisierung von LPP-Brennkammern muss die Erzeugung des Kraftstoff-Luft-Gemischs sehr schnell und innerhalb einer kurzen Strecke abgeschlossen sein, andernfalls kommt es zu negativen Auswirkungen auf das Betriebsverhalten des Flugtriebwerks.

5.2.1 Beschreibung der Konfiguration

Die Geometrie des Rechengebietes für den LJCF setzt sich aus einer zylindrischen Düse und einem Quader zusammen. Der Quader repräsentiert den luftführenden Kanal, in den die durch die Düse strömende Flüssigkeit eingespritzt wird. Dabei liegt der in den Quader führende Austrittsquerschnitt der Düse plan mit der Fläche des Quaders, welche den Kanalboden repräsentiert. Abbildung 5.5 veranschaulicht die Geometrie und enthält darüber hinaus die relevanten geometrischen Abmaße des Rechengebietes. Der Kerosinjet wird entlang der z -Achse senkrecht in den Kanal eingebracht, welcher von Luft entlang der x -Achse durchströmt wird. Die Düse ist charakterisiert durch ihre zylindrische Querschnittsform, ihren Durchmesser d und durch ihre Länge. Der Durchmesser und die Länge der Düse sind für die durchgeführten Simulationen so gewählt, dass die modellierte Düse und die in den experimentellen Untersuchungen von Becker und Hassa [1] verwendete Düse identisch sind. Die Abmessungen des luftführenden Kanals entsprechen jedoch nicht denen, aus dem experimentellen Versuchsaufbau, sondern sind aus Rechenzeitgründen kleiner gewählt. Auf diesen Punkt wird im weiteren Verlauf an entsprechender Stelle genauer eingegangen. Durch den roten Punkt in Abbildung 5.5 ist der Koordinatenursprung im Rechengebiet definiert. Er liegt auf Höhe des Kanalbodens im Mittelpunkt des Düsenquerschnitts.

Zur Beschreibung des LJCF mittels dimensionsloser Kenngrößen werden folgende Kennzahlen herangezogen:

- Weber-Zahl der Flüssigkeit

¹ Liquid Jet in Crossflow

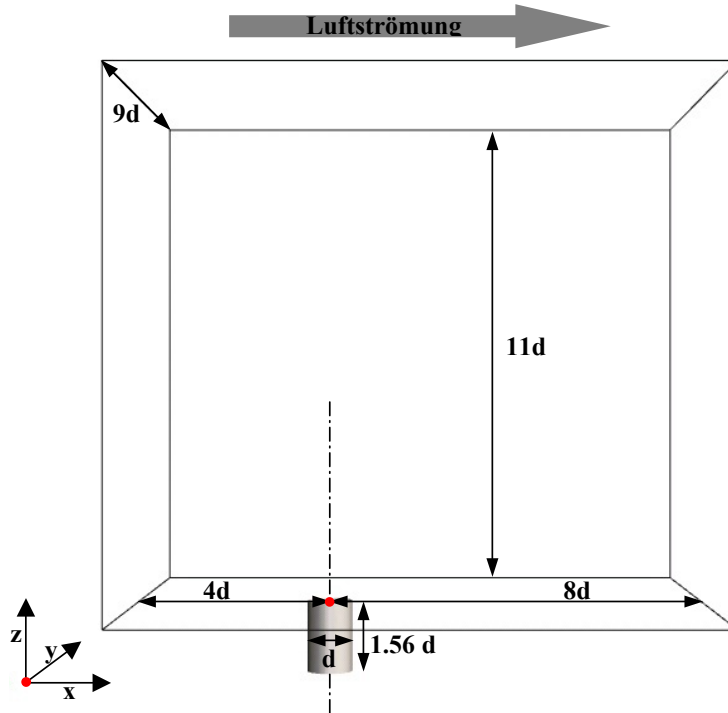


Abbildung 5.5: Geometrie des numerisch untersuchten Gebietes

$$We_{liq} = \frac{\rho_l U_{b,l}^2 d}{\sigma}, \quad (5.1)$$

- Weber-Zahl der Luftströmung

$$We_{cf} = \frac{\rho_g U_{b,g}^2 d}{\sigma}, \quad (5.2)$$

- Reynolds-Zahl der Flüssigkeit

$$Re_{liq} = \frac{U_{b,l} d}{\nu_l}, \quad (5.3)$$

- Reynolds-Zahl der Luftströmung

$$Re_{cf} = \frac{U_{b,g} D_h}{\nu_g}, \quad (5.4)$$

- Dichteverhältnis

$$\eta = \frac{\rho_l}{\rho_g}. \quad (5.5)$$

Hierbei stehen:

- d für den Düsendurchmesser,

- D_h für eine charakteristische Länge der Luftströmung, in diesem Fall der hydraulische Durchmesser des Kanals aus den Experimenten [1],
- $U_{b,l}$ für die über den Düsenquerschnitt gemittelte Geschwindigkeitskomponente der Flüssigkeit entlang der Düsenachse,
- $U_{b,g}$ für die über den Kanalquerschnitt gemittelte Geschwindigkeitskomponente der Luftströmung entlang der Kanalachse.

Aus den gezeigten dimensionslosen Parametern lassen sich zwei weitere Kenngrößen zusammenstellen:

- Impulsverhältnis

$$q = \frac{We_{liq}}{We_{cf}}, \quad (5.6)$$

- Ohnesorge-Zahl

$$Oh = \sqrt{\frac{We_{liq}}{Re_{liq}^2}}. \quad (5.7)$$

Insgesamt bleibt es jedoch bei fünf unabhängigen dimensionslosen Kenngrößen, um den LJCF zu charakterisieren.

Der LJCF ist seit mehreren Jahrzehnten Objekt experimenteller Forschungsarbeiten und wird bis heute auch weiterhin experimentell untersucht, für einen ausführlichen Überblick sei auf [1], [3], [48], [77], [82], [90] und die darin enthaltenen Literaturangaben verwiesen. Die meisten dieser Arbeiten haben den Fokus auf die Untersuchung des makroskopischen Verhaltens des LJCF gelegt und haben somit Angaben zur Trajektorie des Jets, zur Eindringtiefe und Verteilung des Sprays und zu phänomenologischen Mechanismen beim Zerfall der Flüssigkeitssäule gemacht. So haben Wu et al. [90] bei der Untersuchung laminarer flüssiger Jets bei atmosphärischem Umgebungsdruck zwei verschiedene Zerfallsmechanismen isolieren können. Für kleine Impulsverhältnisse q und kleine Weber-Zahlen für die Luftströmung We_{cf} dominiert der Zerfallsmechanismus, welcher als *column breakup* oder auch *bag breakup* bezeichnet wird. Beim *column breakup* kommt es ab einer bestimmten Distanz zur Düse zur Bildung großskaliger taschenförmiger flüssiger Strukturen und im Anschluss zerfällt die Flüssigkeitssäule in großskalige Fragmente, welche im weiteren Verlauf je nach Strömungsverhältnissen in einer großen Bandbreite von Tropfengrößen resultieren. Um diese Beschreibung des *bag breakup* zu veranschaulichen, sei auf Abbildung 5.6 verwiesen, welche der Arbeit von [3] entnommen ist. Dieses Bild veranschaulicht in guter Weise das beschriebene



Abbildung 5.6: Instantanes Bild des *bag breakup*, entnommen aus [3]

Phänomen. Wu et al. [90] beschreiben weiter, dass für große Impulsverhältnisse und große Weber-Zahlen der Luftströmung das Phänomen des sogenannten *surface breakup* oder auch *shear breakup* dominiert, bei dem es zu der Abspaltung kleiner flüssiger Strukturen von der Oberfläche der Jets kommt. Auch dieses Phänomen soll anhand einer Abbildung aus der Arbeit von [3] veranschaulicht werden, siehe Abbildung 5.7. Diese klare Trennung zwischen den beschriebenen Zerfallsmechanismen bleibt im Fall turbulenter Jets nicht erhalten, vielmehr können beide Erscheinungsformen gemeinsam auftreten, siehe dazu [48]. Die experimentellen Untersuchungen von [1] und [3] gehören zu den wenigen, die bei erhöhtem Umgebungsdruck durchgeführt worden sind und somit auf die Anwendung dieses Zerstäubungskonzepts in LPP-Brennkammern abzielen.

5.2.2 Numerisches Rechengebiet

Aus Rechenzeitgründen ist es nicht vertretbar, den gesamten luftführenden Kanal entsprechend der experimentellen Untersuchung von Becker und Hassa [1] numerisch abzubilden. Der Querschnitt des realen Kanals in [1] beträgt 25 mm x 40 mm, mit dem Zweck, den Einfluss der Kanalberandung - mit Ausnahme des Kanalbodens - auf die Ausbildung des Sprays zu minimieren. In der durchgeführten numerischen Untersuchung liegt der Fokus auf dem Zerfall des Flüssigkeitsstrahls, welcher bereits kurz nach dem Düsenaustritt erfolgt, wodurch gerechtfertigt wird, die Abmessungen des modellierten Kanals kleiner zu wählen und somit die Anzahl von Gitterpunkten in einem



Abbildung 5.7: Instantanes Bild des *shear breakup*, entnommen aus [3]

vertretbaren Rahmen zu halten. Die Abmessungen des numerischen Rechengebietes sind in Abbildung 5.5 dargestellt und werden in Tabelle 5.2 nochmals aufgelistet. Darin sind die Abstände der Ränder des Quaders zum Düsenaustritt zu sehen.

Tabelle 5.2: Abstände der Kanalberandung zum Düsenaustritt

Lufteinlass	-> Düse	$\Delta x = 4d (= 1,8 \text{ mm})$
Düse	-> Auslass	$\Delta x = 8d (= 3,6 \text{ mm})$
Kanalboden	-> oberer Rand	$\Delta z = 11d (= 4,95 \text{ mm})$
Düse	-> seitliche Ränder	$\Delta y = \pm 4,5d (= \pm 2,025 \text{ mm})$

Der für die Simulationen modellierte luftführende Kanal hat somit Abmessungen von $12d \times 9d \times 11d$. Der Abstand zwischen Lufterinlass und der Düse hat eine Länge von vier Düsendurchmessern, die der Luftströmung zur Verfügung steht, sich auszubilden. Bei der Wahl der Höhe des Rechengebietes von elf Düsendurchmessern sind experimentell ermittelte Korrelationen für die Trajektorie des Jets aus den Arbeiten von Bellofiore [3] und von Becker und Hassa [1] herangezogen worden. In beiden Arbeiten ist eine Korrelation für den Verlauf der oberen windseitigen Kontur des Jets entlang der Kanalachse angegeben. Die Korrelation nach Bellofiore [3] lautet

$$\frac{z}{d} = 2,23 q^{0,44} We_{cf} \left(\frac{x}{d} \right)^{0,367}, \quad (5.8)$$

Becker und Hassa [1] schlagen folgende Korrelation vor

$$\frac{z}{d} = 1,57 q^{0,36} \ln \left(1 + 3,81 \frac{x}{d} \right). \quad (5.9)$$

Die Korrelation nach Gleichung (5.9) ergibt die höheren Werte für die vertikale Ausbreitung des Jets und dient somit als konservative Abschätzung der Strahlausbreitung. Für einen Wert des Impulsverhältnisses von $q = 6$ ergibt sich für die vertikale Ausbreitung des Jets am Auslass des Kanals ein Wert von $\frac{z}{d} = 10,4$. Da der Strahlzerfall am Auslass des Rechengebietes abgeschlossen sein wird und dieser Bereich nicht im Fokus der Simulationen liegt, wird eine Höhe des Kanals von elf Düsendurchmessern als ausreichend erachtet, zumal im Bereich des Düsenaustritts die Luftströmung bei dieser Kanalhöhe genügend Platz hat, den austretenden Strahl zu überströmen.

Bei einer äquidistanten Vernetzung des Kanals mit einer Gitterweite von $d/30 = 15 \mu\text{m}$ resultiert ein Gitter mit über 32×10^6 Zellen. Um die Anzahl der Gitterpunkte weiter zu reduzieren, wird auf eine äquidistante Vernetzung des Rechengebietes verzichtet und das Gitter lokal in den Regionen verfeinert, wo der Flüssigkeitsstrahl zu erwarten ist. Abbildung 5.8 stellt den lokal verfeinerten Bereich innerhalb des modellierten

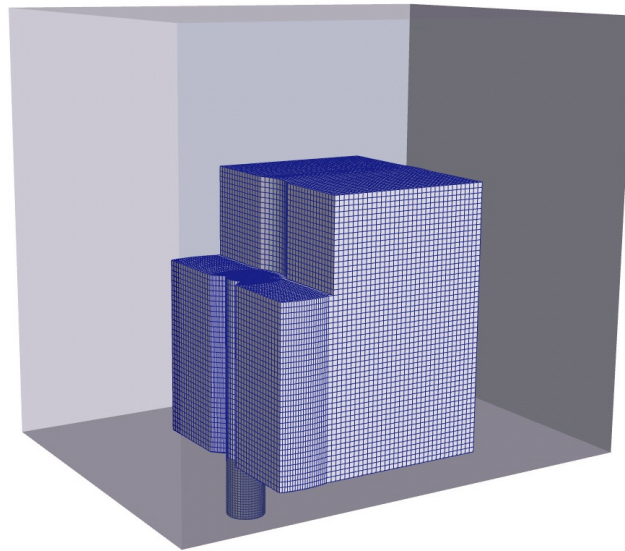


Abbildung 5.8: Darstellung des lokal verfeinerten düsennahen Bereichs

Quaders dar. Die Oberfläche des Quaders ist grau schattiert und die vefeinerte Region als Gittermodell dargestellt. Tabelle 5.3 enthält die Abmessungen des lokal verfeinerten Bereichs innerhalb des Quaders. Die lokale Verfeinerung des Gitters ermöglicht es,

Tabelle 5.3: Abmessungen des lokal verfeinerten Rechengebiets

Verfeinerung entlang der Kanalachse	$\Delta x = 5,2d (= 2,34 \text{ mm})$
Verfeinerung in vertikaler Richtung	$\Delta z = 7d (= 3,15 \text{ mm})$
Verfeinerung in lateraler Richtung	$\Delta y = \pm 2,8d (= \pm 1,26 \text{ mm})$

die Anzahl der Gitterpunkte deutlich zu reduzieren, da Gebiete, in denen keine flüssi-

gen Strukturen zu erwarten sind, grob vernetzt sind. Eine detaillierte Beschreibung des verwendeten Gitters findet sich im folgenden Abschnitt.

5.2.3 Betriebsparameter und Rechengitter

Die Untersuchung des LJCF umfasst drei Simulationen, im Folgenden mit Fall A, A2 und B bezeichnet. Die charakteristischen dimensionslosen Kennzahlen der Fälle sind Tabelle 5.4 zu entnehmen. In Tabelle 5.5 sind die dimensionsbehafteten Parameter zusammengetragen.

Tabelle 5.4: Dimensionslose Kennzahlen der simulierten Fälle

Parameter	Fall A, A2	Fall B	Einheit
We_{liq}	2782	4204	–
We_{cf}	695	695	–
Re_{liq}	3000	3000	–
Re_{cf}	$1,1 \times 10^6$	$1,1 \times 10^6$	–
η	66	66	–
q	4	6	–
Oh	0,018	0,022	–

Tabelle 5.5: Dimensionsbehaftete Parameter der simulierten Fälle

Parameter	Fall A, A2	Fall B	Einheit
σ	0,022	0,022	N/m
$U_{b,l}$	13,1	16,1	m/s
$U_{b,g}$	53,1	53,1	m/s
ρ_l	795	795	kg/m ³
ρ_g	12,05	12,05	kg/m ³
ν_l	$1,96 \times 10^{-6}$	$2,41 \times 10^{-6}$	m ² /s
ν_g	$1,5 \times 10^{-6}$	$1,5 \times 10^{-6}$	m ² /s

Zwischen den Fällen A bzw. A2 und B wird nur eine unabhängige dimensionslose Kenngröße variiert. Dabei handelt es um die flüssige Weberzahl We_{liq} bzw. um das Impulsverhältnis q , welche in Abhängigkeit zueinander stehen. Um eine Erhöhung des Impulsverhältnisses q von vier (Fälle A, A2) auf sechs (Fall B) zu erzielen, wird der Jet-Massenstrom und somit die Geschwindigkeit der Flüssigkeit $U_{b,l}$ erhöht. Einherge-

hend mit der Geschwindigkeitsänderung ändert sich auch die Weberzahl We_{liq} . Um die Reynolds-Zahl Re_{liq} durch die Geschwindigkeitsmodifikation konstant zu halten, wird die kinematische Viskosität der Flüssigkeit ν_l für Fall B entsprechend angepasst. In allen Simulationen ist ein Dichteverhältnis von $\eta = 66$ gewählt. Die Stoffdaten für die Gasphase entsprechen denen für Luft bei einem Druck von 10 bar und einer Temperatur von 290 K. Bei den gewählten Stoffdaten für den Jet handelt es sich um Kerosin bei einer Temperatur von ebenfalls 290 K. Dichte und Oberflächenspannung entsprechen den Werten für das Kerosin aus den Experimenten von Becker und Hassa [1].

Das Rechengitter für die Fälle A und B ist identisch und der Vergleich zwischen diesen Simulationen soll den Einfluss des Impulsverhältnisses q bzw. der Weberzahl We_{liq} auf die Jet-Trajektorie und den Zerfallsprozess untersuchen. Für die Fälle A und A2 sind alle Parameter identisch. Jedoch liegt für den Fall A2 eine höhere Gitterauflösung vor. Eine detaillierte Beschreibung der verwendeten Gitter wird im Folgenden gegeben.

Obwohl der verwendete CFD-Code unstrukturierte Gitter verarbeitet, ist bei der Gittererzeugung auf ein blockstrukturiertes Gitter zugegriffen worden, weil eine blockstrukturierte Vernetzung ein Maximum an Kontrolle über die Qualität der resultierenden Gitterzellen in diesem Fall ermöglicht. Abbildung 5.9 zeigt schematisch einen Schnitt in der x-y-Ebene, um die Anordnung der Blöcke im luftführenden Kanal zu veranschaulichen. Man kann sich Abbildung 5.9 so vorstellen, als ob man von oben auf den Kanalbo-

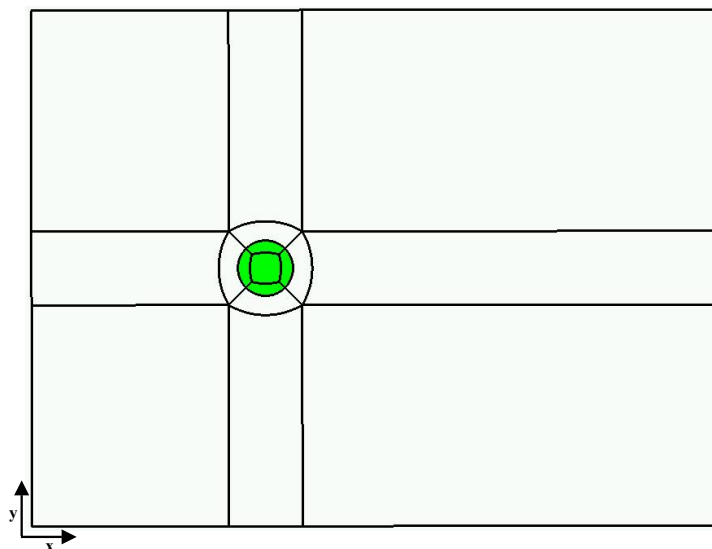


Abbildung 5.9: Blockanordnung zur Vernetzung des Rechengebietes

den schaut. Der Düsenaustrittsquerschnitt, durch den der Jet in den Kanal gelangt, ist durch die grüne Einfärbung hervorgehoben. Die Düse enthält zu ihrer Vernetzung ein O-Gitter, wie im grün markierten Bereich zu erkennen ist. Das O-Gitter der Düse wird von einem weiteren O-Gitter eingehüllt mit dem Zweck, die Fortpflanzung der durch die

kreisförmige Kontur der Düse stark gekrümmten Gitterzellen in das restliche Rechenggebiet zu reduzieren. Die in Abbildung 5.8 dargestellte lokale Verfeinerung des Gitters ist unabhängig von der Blockstruktur und in Abbildung 5.9 somit nicht angedeutet. Abbildung 5.10 zeigt einen Schnitt durch das Rechengitter entlang des Kanalbodens, wobei die lokale Verfeinerung des Rechengitters sichtbar ist. Aufgrund der hohen Anzahl an

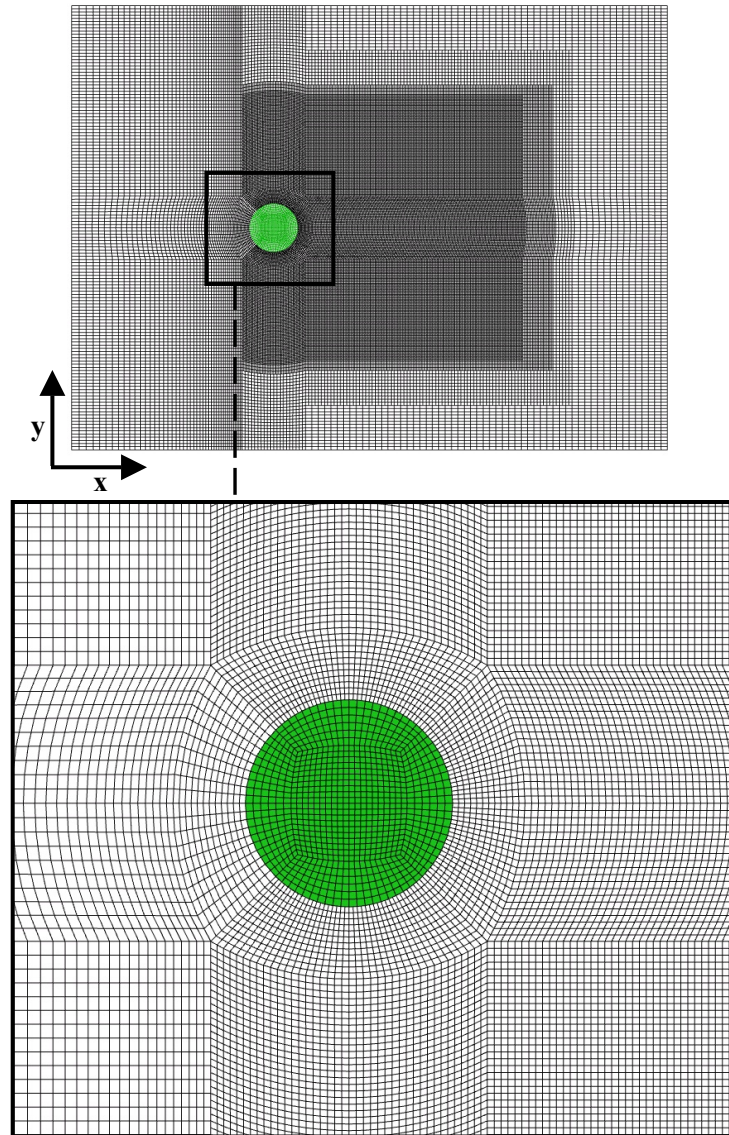


Abbildung 5.10: Gitterstruktur des lokal verfeinerten Gitters in der x-y-Ebene

Gitterlinien ist in Abbildung 5.10 ein den Düsenaustritt einschließendes Rechteck vergrößert dargestellt, wodurch einzelne Gitterlinien sichtbar werden. Die Düse ist in allen drei Simulationen mit 32 Gitterzellen entlang ihres Düsendurchmessers aufgelöst.

Sobald der Jet aus der Düse tritt, befindet er sich im lokal verfeinerten Bereich des luftführenden Kanals, wie er in Abbildung 5.8 dargestellt ist. Der Unterschied der beiden verwendeten Gitter liegt in der Auflösung des lokal verfeinerten Bereichs. In Tabelle

5.6 sind die Gitterauflösungen des lokal verfeinerten Bereichs in jede Raumrichtung und die Größe des gesamten Gitters angegeben. Für die Simulationen A und B beträgt

Tabelle 5.6: Gitterauflösung im lokal verfeinerten Bereich des luftführenden Kanals und Größe des gesamten Gitters

Parameter	Fall A, B	Fall A2
Δx_{\min}	$d/30$ ($=15\mu\text{m}$)	$d/30$ ($=15\mu\text{m}$)
Δy_{\min}	$d/30$ ($=15\mu\text{m}$)	$d/30$ ($=15\mu\text{m}$)
Δz_{\min}	$d/15$ ($=30\mu\text{m}$)	$d/30$ ($=15\mu\text{m}$)
Zellenanzahl	$5,55 \times 10^6$	$10,12 \times 10^6$

die Auflösung des verfeinerten Bereichs $15\mu\text{m} \times 15\mu\text{m} \times 30\mu\text{m}$, während für Simulation A2 die Auflösung $15\mu\text{m} \times 15\mu\text{m} \times 15\mu\text{m}$ beträgt.

5.2.4 Randbedingungen und Simulationsparameter

Zur Simulation dieses Testfalls wird auf die Large-Eddy-Simulation zugegriffen und als Feinstrukturmodell wird das Eingleichungsmodell für die turbulente kinetische Energie der Feinstruktur k_{sgs} nach Yoshizawa [91] verwendet, siehe Kapitel 2.4.1. Die Modellkonstanten dieses Modells sind mit den Werten $C_k = 0,07$ und $C_\varepsilon = 1,05$ belegt.

Einstromrand Kanal

Wie in Kapitel 3.5 beschrieben, werden an Einstromrändern Werte für das Geschwindigkeitsfeld und alle skalaren Größen bis auf den Druck in Form einer Dirichlet-Randbedingung vorgegeben.

Die Distanz zwischen Lufteinlass und Düsenaustritt ist mit vier Düsendurchmessern zu kurz, damit sich eine turbulente Strömung vollständig ausbilden kann. Daher ist für die Geschwindigkeit \mathbf{U} am Einstromrand ein transients Datensatz generiert worden, um ein fluktuierendes Geschwindigkeitsfeld am Lufteinlass zu erhalten. Dazu ist das von Klein [42] entwickelte Verfahren zur Erzeugung pseudoturbulenter Geschwindigkeitsfluktuationen verwendet worden. Das Vorgehen zur Erzeugung des Datensatzes ist im Folgenden beschrieben.

Da der Kanal für die Simulation nur ein Teilgebiet des experimentellen Kanals darstellt, ist mittels einer RANS-Rechnung der komplette experimentelle Kanal einphasig gerechnet worden. Als Ergebnis ist ein stationäres Geschwindigkeitsprofil beim gewünschten

Luftmassenstrom hervorgegangen. Diesem Profil sind nach der Methode von Klein [42] erzeugte Fluktuationen überlagert worden, woraus ein Datensatz transienter Geschwindigkeitsprofile hervorgegangen ist. Der geometrisch dem Einstromrand entsprechende Ausschnitt der so erzeugten Profile ist als Eintrittsbedingung für das Geschwindigkeitsfeld transient in jedem Zeitschritt vorgegeben worden.

Für die Erzeugung der Fluktuationen ist ein Längenmaß von 0,5 mm in jede Raumrichtung vorgegeben worden, wobei das Längenmaß in x -Richtung in Zusammenhang mit der querschnittsgemittelten Geschwindigkeit $U_{b,g}$ auch als Zeitmaß zu verstehen ist. Des Weiteren ist ein Turbulenzgrad von 5% des Wertes $U_{b,g}$ und isotrope Turbulenz angenommen worden.

Die Volumenfraktion der flüssigen Phase γ ist am Lufteinlass mit dem Wert Null belegt.

In Abhängigkeit von den transienten Einlassdaten der Geschwindigkeit sind Werte für k_{sgs} ermittelt worden und ebenfalls als transiente Randbedingung für jeden Zeitschritt vorgegeben worden. Dabei ist folgender Zusammenhang verwendet worden:

$$k_{sgs} = 2 \frac{C_k}{C_\epsilon} \Delta^2 |\bar{S}|. \quad (5.10)$$

Einstromrand Düse

Wie für den Einstromrand des Kanals ist auch hier für U und k_{sgs} in analoger Weise vorgefahren worden. Für die Erzeugung der Fluktuationen ist ein Längenmaß von 0,08 mm und ein Turbulenzgrad von 5% des Wertes $U_{b,l}$ bei isotroper Turbulenz vorgegeben worden. Für die Volumenfraktion γ gilt am Düseneinlass der Wert Eins.

Ausstromrand

Am Auslass des Kanals gelten die Randbedingungen wie in Kapitel 3.5 beschrieben. Der Druck am Ausstromrand wird mit dem Referenzwert Null belegt.

Düsenwand und Kanalboden

Bei der Düsenwand und dem Kanalboden handelt es sich um feste Wände, vgl. 3.5. Für k_{sgs} ist ein kleiner Wert von 1×10^{-11} aus numerischen Stabilitätsgründen vorgegeben worden.

Obere und laterale Ränder des Rechengebietes

Der obere Rand und die lateralen Ränder des Rechengebietes stellen eine künstliche Begrenzung des Rechengebietes dar, da an diesen Stellen physisch keine Wand vorhanden ist. Für alle Variablen ist an diesen Rändern eine sogenannte slip-Randbedingung vorgegeben worden. Dies entspricht einer Wand ohne Haftbedingung.

5.2.5 Ergebnisse

Für alle drei Simulationen gilt, dass mit der Auswertung der Daten erst nach Ausbildung des Jets im Rechengebiet begonnen wird. Nachdem sich der Jet ausgebildet hat, sollte sich die im Rechengebiet befindliche Masse der Flüssigkeit nicht mehr ändern. Abbildung 5.11 zeigt für die drei Simulationen den Verlauf der flüssigen Masse im Rechengebiet über die Dauer der Auswertungszeit. Der Verlauf der Kurven zeigt, dass die Masse im Rechengebiet um einen festen Mittelwert schwankt. Die Auswertungsdauern

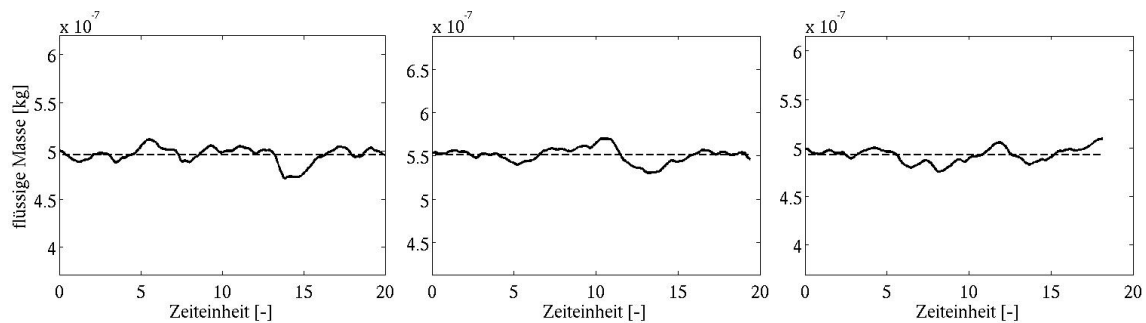


Abbildung 5.11: Zeitlicher Verlauf der flüssigen Masse im Rechengebiet.

links: Fall A, Mitte: Fall B, rechts: Fall A2

Eine Zeiteinheit ist definiert durch $\frac{t \cdot U_{b,l}}{d}$ mit t als Zeit

in Sekunden für die drei Fälle betragen $687\mu\text{s}$ (Fall A), $624\mu\text{s}$ (Fall A2) und $542\mu\text{s}$ (FallB).

Jet-Trajektorie

Abbildung 5.12 zeigt den Vergleich der Jet-Trajektorie zwischen den Simulationen und den experimentellen Korrelationen aus den Arbeiten von Becker und Hassa [1] und Bellofiore [3], siehe Gleichungen (5.8) und (5.9). Bei der Auswertung der Simulationsergebnisse ist zur Darstellung der Phasengrenze in Abbildung 5.12 ein Isowert der Volumenfraktion von $\gamma = 0,5$ gewählt worden. Darüber hinaus stellt Abbildung 5.12 kein instantanes Einzelbild der Phasengrenze dar, sondern eine Überlagerung mehrerer

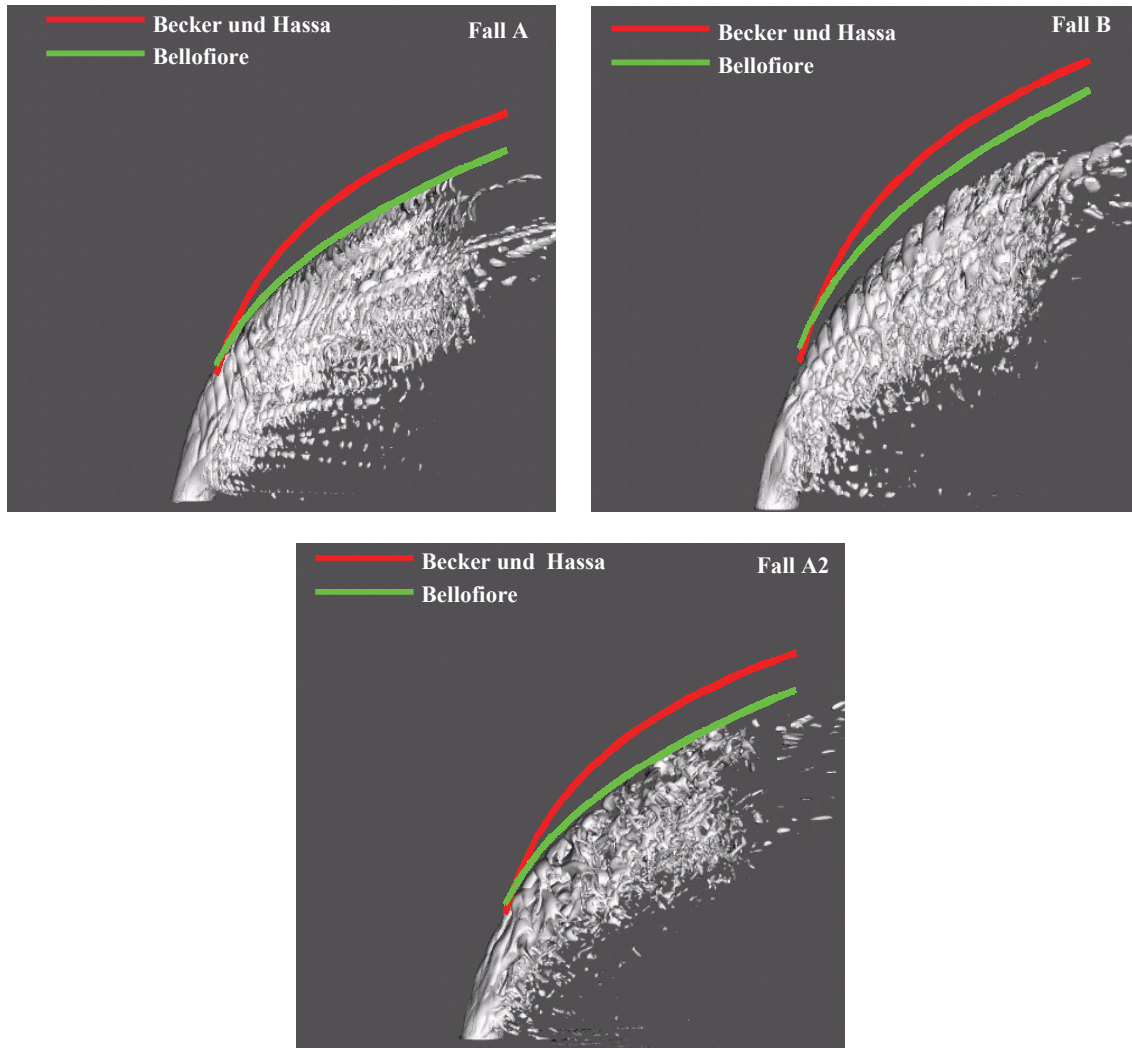


Abbildung 5.12: Vergleich der Jet-Trajektorie zwischen Simulation und experimentellen Korrelationen: Superposition mehrerer Momentaufnahmen der Phasengrenze als Isokontur $\gamma = 0,5$

Momentaufnahmen. Erst durch eine Überlagerung mehrerer instantaner Phasengrenzenpositionen kann die Trajektorie des Jets aus den Simulationsergebnissen dargestellt und mit experimentellen Korrelationen verglichen werden. Die experimentellen Korrelationen stellen den Verlauf der oberen windseitigen Kontur des Jets dar. Für die Fälle A und A2, welche sich bei gleichen Betriebsparametern nur in der Gitterauflösung unterscheiden, liegt eine sehr gute Übereinstimmung mit der von Bellofiore [3] vorgeschlagenen Korrelation vor. In diesem Fall hat die unterschiedliche Gitterauflösung entlang der z -Koordinate keinen Einfluss auf den simulierten Verlauf der windseitigen Kontur des Jets. Die Korrelation von Becker und Hassa [1] weist in allen drei Simulationen für die windseitige Kontur des Jets höhere Werte für die z -Koordinate als in den Simulationen auf. Es sei jedoch angemerkt, dass die grüne Kurve im Bereich der von Becker und Hassa [1] angegebenen Standardabweichung für ihre Korrelation liegt.

Für den Fall B ist die Übereinstimmung zwischen Simulation und der Korrelation von Bellofiore nicht mehr so hoch wie für den Fall A, jedoch immer noch im guten Bereich. Der Vergleich zwischen den Fällen A und B zeigt, dass aufgrund des höheren Impulsverhältnisses in Fall B (Fall A: $q = 4$, Fall B: $q = 6$) der Jet wie zu erwarten entlang der z -Koordinate tiefer in den Kanal eindringt.

Laterale Jet-Kontur

Becker und Hassa [1] haben neben der Korrelation für die Jet-Trajektorie auch eine Korrelation für die laterale Dispersion des Jets angegeben. Die in [1] angegebene Korrelation lautet:

$$\frac{y}{d} = 2,32 q^{0,09} \left(\frac{x}{d} \right)^{0,32}. \quad (5.11)$$

Abbildung 5.13 zeigt einen Vergleich zwischen Korrelation (5.11) und der Simulation für den Fall A2. Wie in Abbildung 5.12 ist auch in Abbildung 5.13 eine Superposition

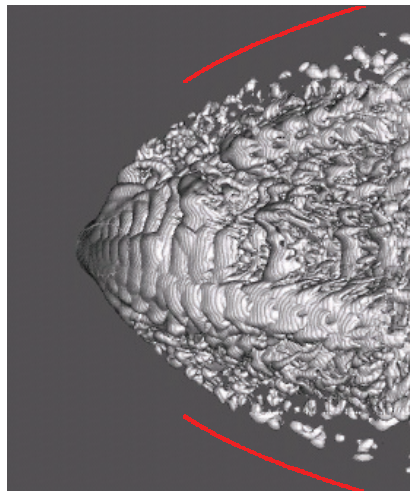


Abbildung 5.13: Vergleich der lateralen Dispersion des Jets für den Fall A2: Superposition mehrerer Momentaufnahmen der Phasengrenze als Isokontur $\gamma = 0,1$

mehrerer Einzelaufnahmen der Phasengrenze dargestellt, um die laterale Kontur des Jets abzubilden. Jedoch ist in diesem Fall für die Darstellung der Phasengrenze ein Isowert für die Volumenfraktion von $\gamma = 0,1$ gewählt. Durch die Wahl eines kleineren Wertes von γ für die Darstellung der Phasengrenze wird erreicht, dass sich die fächerartige Kontur des Jets aufweitet. Jedoch wird selbst durch diese Wahl des Isowertes für γ die von der Korrelation angegebene Aufweitung nicht erreicht. Eine Erklärung hierfür ist, dass die äußerste laterale Kontur des Jets von sehr kleinen Tropfen gebildet wird, welche durch die vorhandene Gitterauflösung nicht abbildbar sind und auch nicht im Fokus dieser Untersuchung liegen.

Charakteristische Eigenschaften des Jets

Abbildung 5.14 zeigt für jeden der drei Fälle eine seitliche Ansicht der Phasengrenze als Zeitsequenz in drei Spalten. In allen drei Simulationen ist die Entstehung und

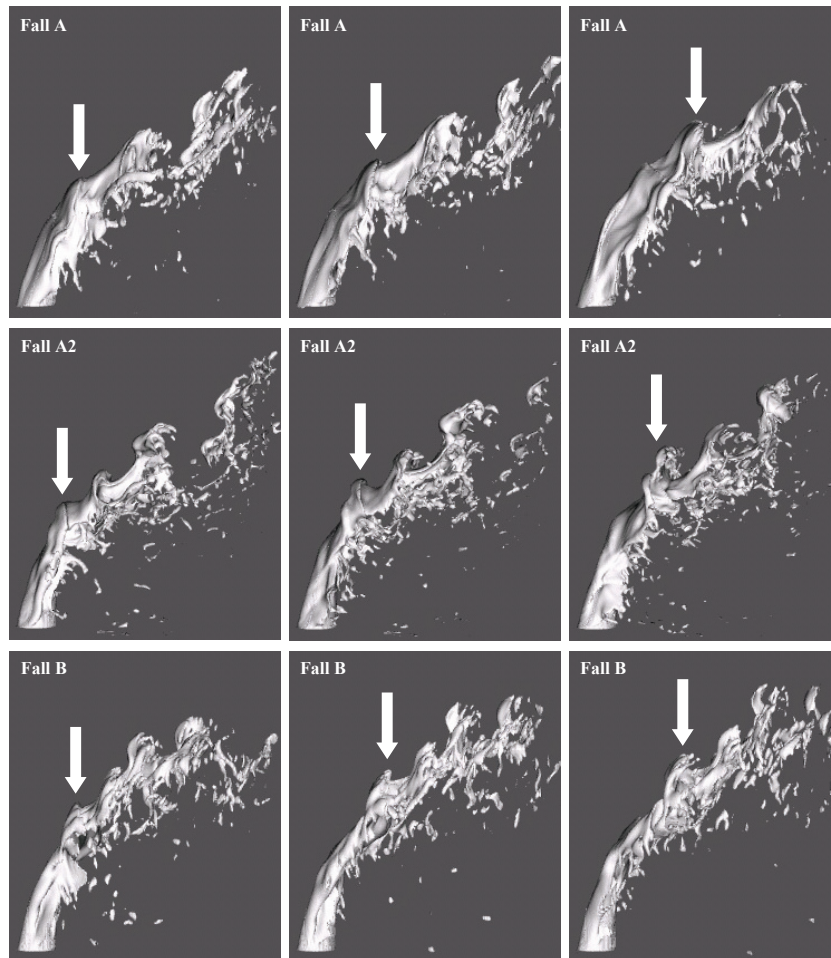


Abbildung 5.14: Entstehung und Amplifizierung von Instabilitäten an der Phasengrenze. Instantane Aufnahmen der Phasengrenze (Isokontur $\gamma = 0,5$) zu verschiedenen Zeiten, Zeitfortschritt von links nach rechts.

Amplifizierung von Instabilitäten an der windseitigen Oberfläche der Phasengrenze zu beobachten. In der linken Spalte kennzeichnen die Pfeile die Formation anfänglich kleiner Wellen auf der Jet-Oberfläche, welche sich mit der Zeit infolge aerodynamischer Kräfte vergrößern (mittlere Spalte) bis sie relativ große taschenförmige Strukturen bilden (rechte Spalte), die zerfallen und in eine Vielzahl von Tropfen unterschiedlicher Größe resultieren, von denen ein großer Teil durch das Gitter nicht auflösbar ist. Dieser Vorgang wird als *bag breakup* bezeichnet und ist in einigen experimentellen Untersuchungen bereits beobachtet worden, wie in Kapitel 5.2.1 erwähnt. Auffallend ist, dass, wie in der linken Spalte für alle drei Simulationen zu sehen, der - zumindest visuell beobachtbare - Beginn der Wellenbildung örtlich mit einer deutlichen Biegung der

Flüssigkeitssäule zusammenfällt. Parallel zum *bag breakup* unterliegt der Jet in allen drei Simulationen auch dem *shear breakup*, welcher durch die Abspaltung von Tropfen und Ligamenten an der Oberfläche des Jets gekennzeichnet ist. Aufgrund des feineren Gitters sind in Abbildung 5.14 für den Fall A2 mehr abgespaltene flüssige Strukturen zu erkennen als in den beiden anderen Fällen. Abbildung 5.15 zeigt zwei Perspektiven des Jets aus Fall A2, in denen die Abtrennung von Tropfen und Ligamenten durch Scherung an der Phasengrenze deutlich wird. Im linken Bild ist zu sehen, dass die Simulation nur

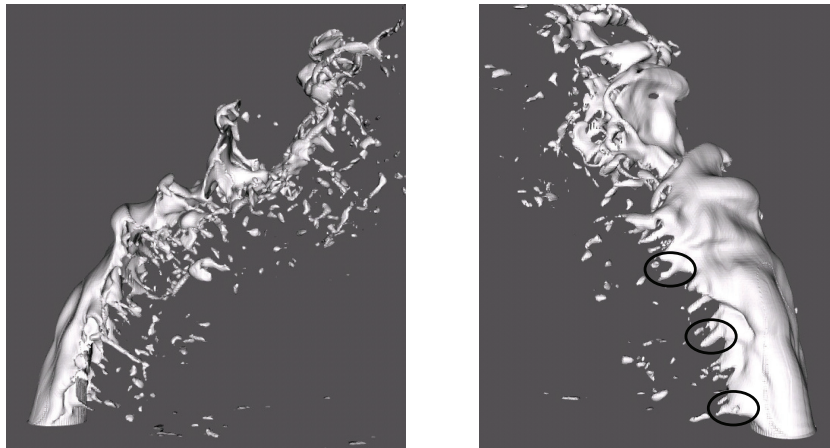


Abbildung 5.15: Instantane Aufnahme der Phasengrenze (Isokontur $\gamma = 0,5$, Fall A2) aus zwei Perspektiven

einen kleinen Teil der durch *shear breakup* entstehenden flüssigen Strukturen auflöst. Dies ist daran zu erkennen, dass diese nur bis zu einem gewissen Abstand zur Flüssigkeitssäule zu sehen sind. Mit zunehmendem Abstand zum Jet sind keine Strukturen mehr zu sehen, was bedeutet, dass diese einem weiteren Zerfall zu kleinen Tropfen unterliegen, welche mit dem Rechengitter nicht aufgelöst werden. Im rechten Bild sind jene Stellen an der Oberfläche des Jets eingekreist, an denen sich längliche Strukturen ausbilden, welche sich im weiteren Verlauf abspalten und einem weiteren Zerfall unterliegen werden. Die Abspaltung an den Seiten des Jets setzt in allen Simulationen unmittelbar nach dem Düsenaustritt ein. Abbildung 5.16 zeigt für die Fälle A2 und B die Kontur des Jet-Querschnitts in einem Schnitt in der x - y -Ebene $200\mu\text{m}$ über dem Düsenaustritt. Durch die Abscherung von Tropfen und Ligamenten unterliegt die Flüssigkeitssäule mit steigendem Abstand zur Düse einem kontinuierlichen Massenverlust. Hinzu kommt eine Verflachung des Querschnitts, wodurch sich die effektive Fläche des Jets, an der aerodynamische Kräfte wirken können, vergrößert, bis es schließlich zu einer starken Biegung der Flüssigkeitssäule und der Abspaltung großer taschenförmiger Strukturen kommt.

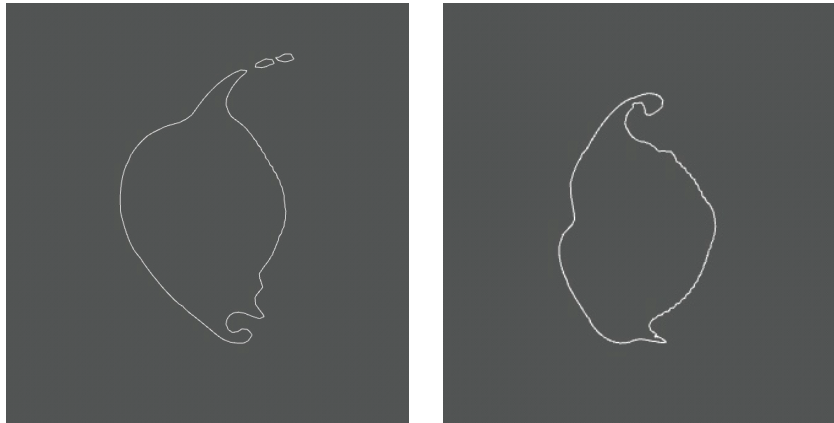


Abbildung 5.16: Instantaner Querschnitt des Jets $200\ \mu\text{m}$ über dem Düsenaustritt; links: Fall A2, rechts: Fall B

Ein weiteres Charakteristikum aller drei Simulationen ist eine ausgeprägte Asymmetrie des Jets, wie in Abbildung 5.17 anhand einer Momentaufnahme der Phasengrenze aus Fall A2 zu sehen ist.



Abbildung 5.17: Asymmetrie des Jets, Isokontur $\gamma = 0,5$ aus Fall A2

Aufgelöster Massenstrom der Flüssigkeit

Bei der Vorstellung der Simulationsergebnisse ist bereits hervorgegangen, dass das Rechengitter flüssige Strukturen, die eine bestimmte Größe unterschreiten, nicht mehr adäquat auflösen kann. Zur Definition der Phasengrenze werden Konturen herangezogen, die sich aus einem Isowert der Volumenfraktion von $\gamma = 0,5$ ergeben. Dieser willkürlich gewählte Wert dient im Folgenden als Grenze zwischen aufgelösten und

nicht aufgelösten flüssigen Strukturen. Abbildung 5.18 stellt für alle drei durchgeführten Simulationen den nach obiger Definition als aufgelöst geltenden Massenstrom über dem Abstand zum Düsenaustritt entlang der Kanalachse dar.

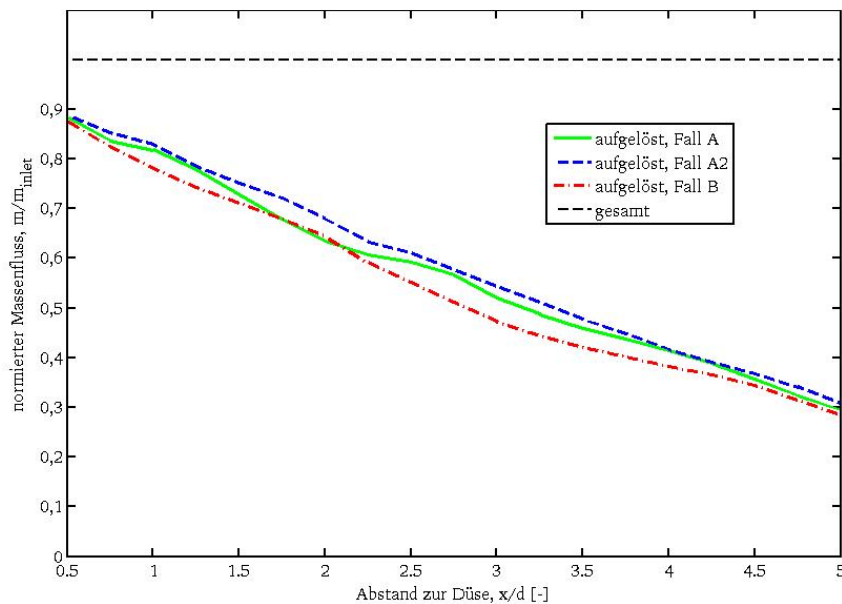


Abbildung 5.18: Anteil des jeweils aufgelösten Massenstroms bei den Simulationen A, A2 und B

Auffallend ist, dass für alle drei Simulationen bereits am Düsenaustritt etwa 10% des Massenstroms nicht aufgelöst werden. Dies deutet auf die Erzeugung und Abspaltung flüssiger Strukturen hin, unmittelbar nachdem der Jet aus der Düse tritt. Der Vergleich zwischen Fall A und A2 zeigt keinen deutlichen Unterschied in der Massenstromauflösung für das feinere Gitter aus Fall A2. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die Gitterverfeinerung entlang nur einer Raumrichtung durchgeführt worden ist. Der Vergleich zwischen Fall A und B, wobei Fall B eine erhöhte flüssige Weber-Zahl aufweist, zeigt keinen sehr großen, jedoch nicht zu übersehenden Unterschied. Der aufgelöste Massenstrom in Fall B liegt fast über die gesamte erfasste Strecke unter dem aus Fall A. Diese Beobachtung ist konsistent mit der Vermutung aus [62], dass eine steigende flüssige Weber-Zahl Einfluss auf die kleinen flüssigen Strukturen hat.



6 Eingebettete DNS am Beispiel eines generischen Testfalls

In diesem Kapitel wird eine „eingebettete DNS“ an einer vereinfachten Geometrie durchgeführt. Der eingebetteten DNS liegt der Gedanke zugrunde, einen Zerstäubungsvorgang mittels DNS zu simulieren, ohne die detaillierte Geometrie der Zerstäubungsapparatur (bspw. einer Airblast-Zerstäuberdüse) in der DNS abbilden zu müssen. Die Idee des Konzeptes soll im Folgenden erläutert werden.

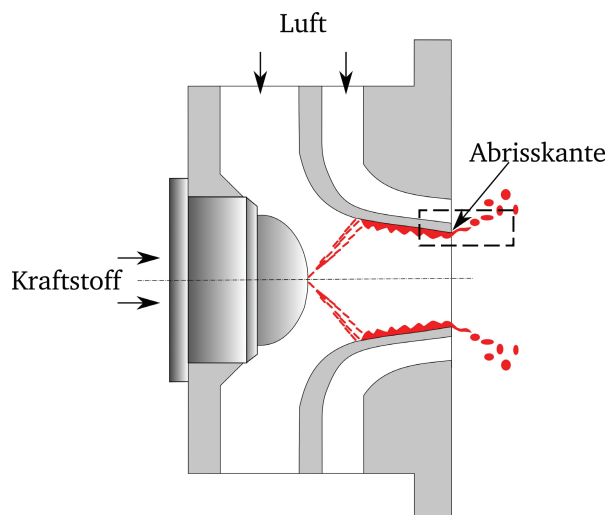


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung eines Airblast-Zerstäubers nach [15]

Abbildung 6.1 zeigt die schematische Darstellung eines Airblast-Zerstäubers. Ein Kraftstoffstrahl wird auf eine Wand aufgetragen und es entwickelt sich ein flüssiger Wandfilm. Luft strömt drallbehaftet durch jeweils einen äußeren und einen inneren Kanal. Im inneren Kanal kommt es zum Kontakt zwischen Luftströmung und Kraftstofffilm, wodurch dieser entlang der filmtragenden Wand zur Abrisskante transportiert wird und es dort zum Zerfall des Flüssigkeitsfilms und zur Tröpfchenentstehung kommt. Die DNS der gesamten Zerstäuber-Geometrie ist aufgrund der nötigen Rechenkapazität heute nicht realisierbar und der interessierende Bereich - der Ort der Tropfenentstehung - nimmt im Vergleich zur gesamten Geometrie einen kleinen Teil ein. Daher liegt der Gedanke nahe, nur den interessierenden Bereich - gestrichelt eingerahmt - mittels DNS abzubilden und es ergibt sich die Problemstellung, geeignete Randbedingungen für die

Ränder des gewählten DNS-Gebietes vorzugeben. Die dazu notwendigen Werte für die Ränder des DNS-Rechengebietes können aus einer vorgeschalteten einphasigen LES des kompletten Injektors bezogen werden, welche in ihrem Rechenaufwand unter dem einer DNS liegt. Darüber hinaus können Eintrittsrandbedingungen für den flüssigen Wandfilm in ähnlicher Weise gewonnen werden, indem eine zweiphasige Simulation vorgeschaltet wird, welche die zu verwendenden Werte erzeugt.

Dieses Konzept wird im Folgenden an einer vereinfachten Geometrie umgesetzt und die Vorgehensweise dabei detailliert erläutert.

6.1 Geometrie

Abbildung 6.2 zeigt die gewählte Geometrie, welche zur Erprobung dieses Konzeptes herangezogen wird. Es handelt sich dabei um einen ypsilonförmigen, dreidimensionalen Kanal, welcher in z -Richtung einen homogenen Verlauf hat.

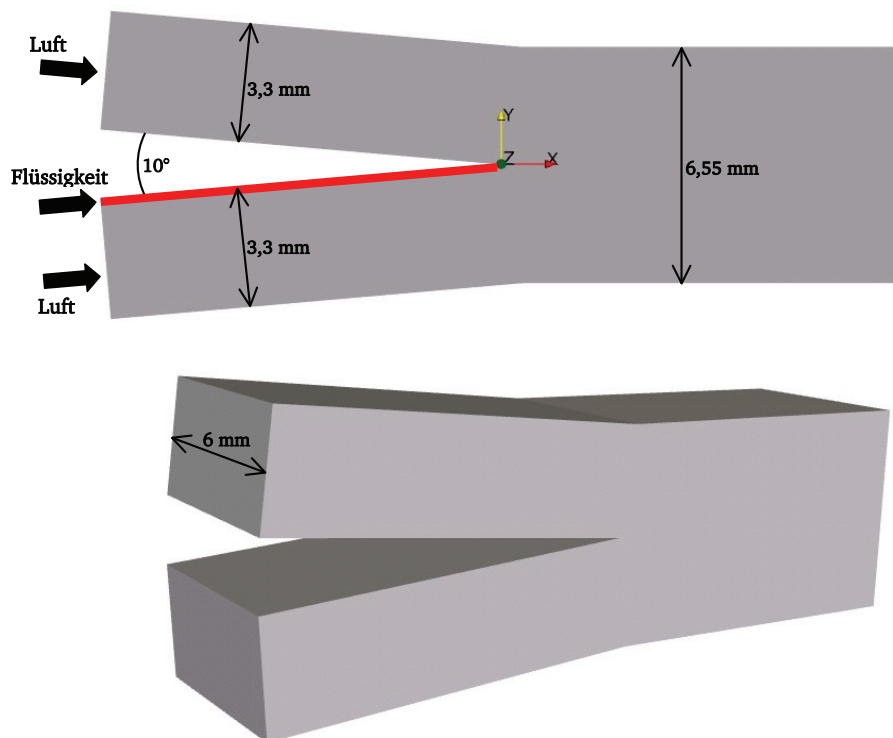


Abbildung 6.2: Darstellung der Geometrie für das Konzept der einebetteten DNS

Der obere Ast der ypsilonförmigen Verzweigung stellt den luftführenden Abschnitt dar und im unteren Ast strömen sowohl Luft als auch die Flüssigkeit, welche entlang der filmtragenden Wand zum Treffpunkt von oberem und unterem Ast transportiert und dort zerschert werden soll. Ziel ist es, eine DNS eines Teilgebietes in unmittelbarer Nähe

zum Treffpunkt der beiden Äste durchzuführen, welche etwa $8\,\mu\text{m}$ Gitterauflösung in jede Raumrichtung aufweisen soll. Die Anzahl der Gitterpunkte für die DNS soll dabei bis zu 12×10^6 betragen. Die Auswahl und Einbettung des DNS-Rechengebietes im Gesamtgebiet ist im oberen Teil von Abbildung 6.3 dargestellt. Im unteren Teil ist das vernetzte DNS-Gebiet vergrößert dargestellt. Zur Anschaulichkeit der Gitterzellen ist in Abbildung 6.3 nur jede achte Gitterlinie sichtbar. Stromab des Treffpunktes beider Äste beträgt die Länge des DNS-Gebietes in Strömungsrichtung 2 mm. Bei den gewählten Abmessungen und einer gewünschten Gitterzellengröße von etwa $8\,\mu\text{m}$ resultiert ein Gitter mit knapp unter 12 Millionen Kontrollvolumen.

Nach der Festlegung des Rechengebiets für die DNS muss bestimmt werden, welche Simulationen für die Generierung der DNS-Randbedingungen notwendig sind. Dabei handelt es sich zum Einen um eine einphasige LES des ypsilonförmigen gesamten Kanals und zum Anderen um eine zweiphasige Simulation eines flüssigen Wandfilms. Darauf wird im Folgenden eingegangen.

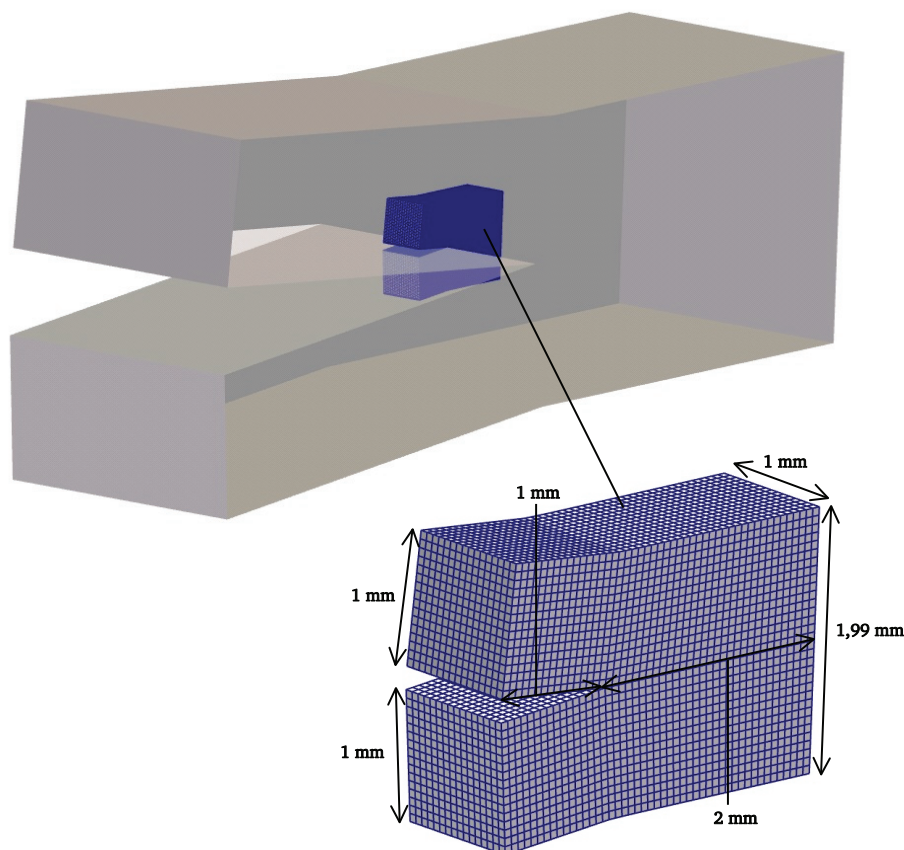


Abbildung 6.3: Eingebettete (oben) und vergrößerte (unten) Darstellung des DNS-Gebietes (blau) im ypsilonförmigen Kanal

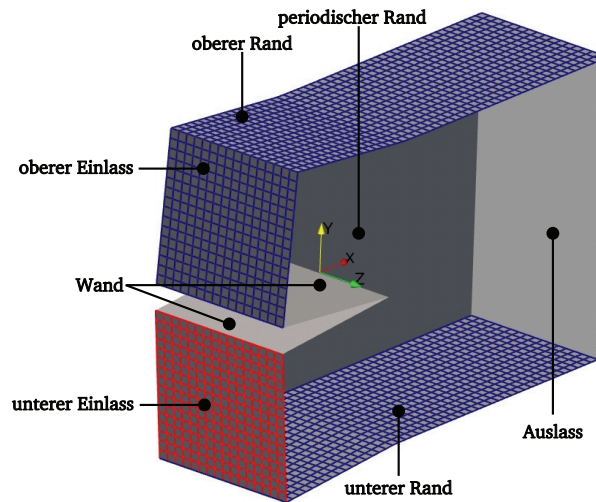


Abbildung 6.4: Veranschaulichung der einzelnen Ränder des DNS-Gebietes. Der laterale Rand auf der positiven z -Achse ist ausgeblendet.

6.2 Simulationen zur Erzeugung von Randbedingungen für die DNS

Nachdem das Gebiet für die DNS festgelegt ist, sind die Randbedingungen für die spätere DNS festzulegen. Dies soll anhand von Abbildung 6.4 veranschaulicht werden. Zu sehen sind die Ränder des DNS-Rechengebietes, farblich verschieden markiert. Aus einer einphasigen LES des Kanals aus Bild 6.2 lassen sich Daten zur Verwendung für die blau markierten Ränder verwenden. Für die lateralen Ränder, von denen in Abbildung 6.4 nur einer der beiden dargestellt ist, können die Daten aus der einphasigen LES nicht genutzt werden, da die Entwicklung des flüssigen Wandfilms im unteren Ast dadurch verfälscht würde. Für die lateralen Ränder der DNS ergibt sich daher die Vorgabe einer periodischen Randbedingung. An dieser Stelle ist anzumerken, dass die laterale Erstreckung des Gebietes entlang der z -Achse von 1 mm für die Vorgabe von Periodizität die Gasphase betreffend, nicht groß genug gewählt ist. Dies wird jedoch hier in Kauf genommen, um die Anzahl der Gitterzellen in Grenzen zu halten. Hinzu kommt, dass für die flüssige Phase, welche sich als dünner Film entlang der Wand bewegt, angenommen werden kann, dass 1 mm laterale Erstreckung für die Vorgabe von Periodizität akzeptabel ist. Für den rot markierten unteren Einlass in Abbildung 6.4 werden die Einlassdaten aus der zweiphasigen Berechnung eines flüssigen Wandfilms bezogen. Bei den restlichen Rändern handelt es sich um die Wände und den Auslass. Diese Ränder benötigen keine zuvor erzeugten Daten. Für die Randbedingungen auf diesen Rändern sei auf Kapitel 3.5 verwiesen.

Einphasige LES

Die Durchführung einer LES des Kanals aus Abbildung 6.2 soll die Werte des Geschwindigkeitsfeldes liefern, welche als transiente Dirichlet-Randbedingung auf den blau markierten Rändern aus Abbildung 6.4 in jedem Zeitschritt der DNS einzusetzen sind. Dazu ist in jedem berechneten Zeitschritt der LES das aktuelle Geschwindigkeitsfeld aus dem Inneren des Rechengebietes auf die entsprechenden Ränder des DNS-Rechengebietes zu interpolieren. Darüber hinaus ist davon auszugehen, dass die verwendete Zeitschrittweite für die LES größer als jene für die DNS ist. In diesem Fall sind die räumlich interpolierten Geschwindigkeitsdaten während der späteren DNS-Rechnung in Abhängigkeit von der DNS-Zeitschrittweite auch zeitlich zu interpolieren. Sowohl im Raum, als auch in der Zeit wird linear interpoliert.

Bei der Erzeugung des LES-Gitters ist darauf zu achten, dass die Gitterzellen im Bereich des Gebietes für die anschließende DNS eine möglichst hohe Auflösung aufweisen, die Gesamtanzahl der Gitterzellen jedoch in einem vertretbaren Rahmen bleibt. Das erzeugte Gitter zur Vernetzung des LES-Rechengebietes besteht aus ca. 5,27 Millionen Gitterzellen. Im für die Interpolation auf den oberen und unteren Rand des DNS-Gebiets relevanten Bereich haben die Gitterzellen eine Größe von etwa $30\mu\text{m} \times 45\mu\text{m} \times 40\mu\text{m}$. Das Gitter für die DNS weist eine äquidistante Auflösung von $8\mu\text{m}$ in jede Raumrichtung auf.

Bei der LES wird das Smagorinsky-Modell mit der Modellkonstanten $C_s = 0,16$ verwendet. Tabelle 6.1 fasst für die Gasphase die verwendeten Stoffeigenschaften und die querschnittsgemittelte Geschwindigkeit am Eintritt des oberen und unteren Astes zusammen. Die mit der Kanalhöhe am Eintritt von 3,3 mm, siehe Abbildung 6.2, und den Werten aus Tabelle 6.1 für beide Äste gebildete Reynolds-Zahl liegt knapp unter 11000.

Tabelle 6.1: Eigenschaften der Gasphase

Parameter		
$U_{g,b,\text{oberer Ast}}$	49,6	m/s
$U_{g,b,\text{unterer Ast}}$	49	m/s
ρ_g	1,2	kg/m ³
ν_g	$1,5 \times 10^{-5}$	m ² /s

Der in Abbildung 6.2 dargestellte Kanal besteht aus insgesamt zwei Einstromrändern für den oberen und unteren Ast, einem Ausstromrand, zwei lateralen Rändern, für welche Periodizität vorgegeben wird, und aus den restlichen Rändern, welche als feste

Wände zu betrachten sind. Die Vorgabe der Randbedingungen für Geschwindigkeit und Druck erfolgt an den jeweiligen Rändern wie in Kapitel 3.5 beschrieben. Für die Vorgabe des Geschwindigkeitsfeldes an den Einstromrändern wird - wie auch in Kapitel 5.2 angewandt - ein Datensatz nach der Methode von Klein [42] erzeugt, um pseudoturbulente Geschwindigkeitsfluktuationen in Form einer transienten Dirichlet-Randbedingung bereitzustellen. Dabei werden die erzeugten Fluktuationen jeweils einem zuvor aus einer RANS ermittelten, mittleren Geschwindigkeitsprofil des oberen und unteren Astes überlagert. Der jeweilige querschnittsgemittelte Vektor des mittleren Geschwindigkeitsfeldes für die beiden Äste lautet $\bar{\mathbf{U}}_{g,b,\text{oberer Ast}} = (43,5 \quad -22,6 \quad -8)^T$ bzw. $\bar{\mathbf{U}}_{g,b,\text{unterer Ast}} = (43,5 \quad 22,6 \quad 0)^T$. Im Gegensatz zum unteren Ast wird der Luftströmung im oberen eine Geschwindigkeitskomponente in z -Richtung hinzugefügt, wodurch am Treffpunkt beider Äste eine Scherung in lateraler Richtung entsteht.

Für beide Äste wird bei der Erzeugung der Fluktuationen ein Längenmaß von 0,75 mm in jede Raumrichtung vorgegeben und ein Turbulenzgrad von 5% der jeweiligen mittleren querschnittsgemittelten Geschwindigkeit $\mathbf{U}_{g,b}$ angenommen. Die Durchführung der LES hat einen Datensatz erzeugt, aus dem die gewünschten Werte für die in Abbildung 6.4 blau markierten Ränder extrahiert worden sind.

Zweiphasige zweidimensionale RANS

Nach der Erzeugung der Randbedingungen durch die einphasige LES wenden wir uns nun der Erzeugung der Einstrombedingungen für den in Abbildung 6.4 rot markierten unteren Einlass zu. Für diese Randfläche sind Werte für das Geschwindigkeitsfeld und für die Indikatorfunktion γ zu erzeugen, da durch diesen Einlass der flüssige Film, welcher entlang der geneigten Wand strömen wird, und die ihn treibende Gasströmung in das DNS-Rechengebiet eintreten. Dazu ist die Entwicklung eines flüssigen Wandfilms separat zu simulieren und analog zur einphasigen LES, die in jedem Zeitschritt berechneten Daten weiterzuverarbeiten, um diese als Randbedingung für den unteren Einlass bereitzustellen. Da es sich im vorliegenden generischen Testfall um die Vorstellung des Konzeptes einer eingebetteten DNS handelt und keine quantitativen Referenzdaten zu Vergleichszwecken vorliegen, wird zur Erzeugung der Einlassdaten für den Wandfilm auf eine aufwendigere dreidimensionale Simulation verzichtet und eine zweidimensionale RANS herangezogen, aus welcher Daten entlang einer Linie extrahiert werden. Diese Daten werden anschließend homogen entlang der lateralen Richtung des DNS-Rechengebietes verteilt.

Abbildung 6.5 zeigt das Rechengebiet zur Berechnung des Wandfilms. In blauer Farbe ist die gasförmige Phase und in roter Farbe die flüssige Phase dargestellt. Damit

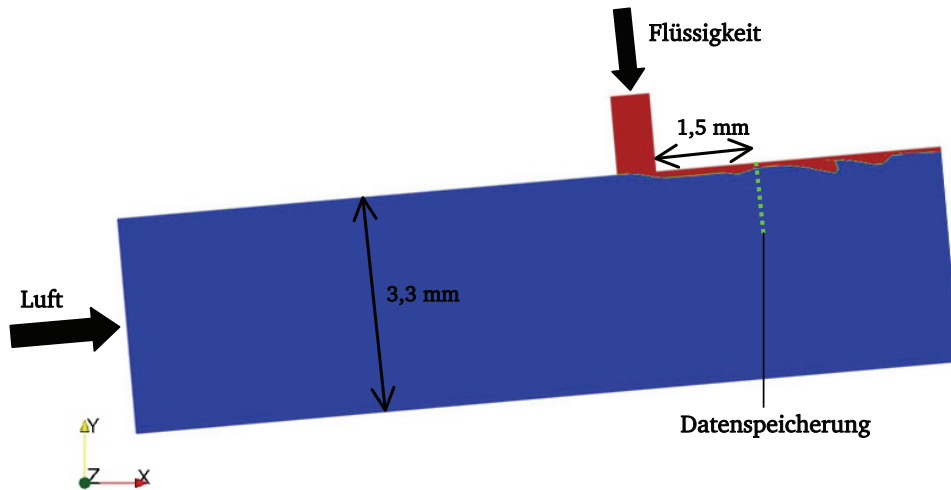


Abbildung 6.5: Darstellung des flüssigen Wandfilms zur Erzeugung von Randbedingungen für die DNS

sich der flüssige Wandfilm entwickelt, wird durch einen Spalt Flüssigkeit in den Kanal eingebracht. Die Breite des Spalts, durch den die flüssige Phase in den Kanal gelangt, beträgt $600\ \mu\text{m}$. In Abbildung 6.5 hat sich der Wandfilm bereits ausgebildet. Die Daten zur Generierung der Randbedingungen für die DNS werden $1,5\ \text{mm}$ stromab des Düsenaustritts gespeichert (siehe grün gepunktete Linie). An dieser Stelle unterliegt der Wandfilm bereits einer Wellenbildung. Das Rechengitter für den flüssigen Wandfilm besteht aus etwa 434.000 Zellen. Im Bereich des flüssigen Wandfilms beträgt die Auflösung des Gitters $8\ \mu\text{m}$ in jede Raumrichtung (zweidimensional). Am Eintritt der Luftströmung in den Kanal wird ein stationäres Geschwindigkeitsprofil vorgegeben. Das Profil entspricht demjenigen, welches in der LES für den unteren Ast zum Einsatz gekommen ist, und weist demnach ebenfalls eine querschnittsgemittelte Geschwindigkeit von $\bar{\mathbf{U}}_{g,b,\text{unterer Ast}} = (43,5 \ 22,6 \ 0)^T$ auf. Am Einstromrand für die Flüssigkeit wird eine querschnittsgemittelte Geschwindigkeit von $|\bar{\mathbf{U}}_{fl,b}| = 0,125 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ vorgegeben. Dies entspricht einer breitenbezogenen Filmbeladung von $\Lambda = 0,75 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$. Der flüssige Wandfilm, der sich dabei entwickelt, weist eine mittlere Filmhöhe von $114\ \mu\text{m}$ auf. Zur Berechnung des Wandfilms ist das Low-Reynolds $k-\epsilon$ Modell von Launder und Sharma [46] zum Einsatz gekommen.

Durch diese Simulation ist ein transienter Datensatz generiert worden, welcher zur Vorgabe des Geschwindigkeitsfeldes und der Indikatorfunktion γ für den in Abbildung 6.4 rot markierten Rand die Dirichlet-Randbedingungen für die DNS liefert. Bei der Wahl des Ortes zur Datenspeicherung, grüne Linie in Abbildung 6.5 ist beachtet worden, die wellenförmige Auslenkung der Phasengrenze zu berücksichtigen.

Hiermit sind alle benötigten Randbedingungen für die DNS bereitgestellt. Tabelle 6.2 fasst die Stoffeigenschaften der flüssigen Phase zusammen. Die Stoffdaten für die flüssige Phase entsprechen Werten, wie sie für Kerosin bei Umgebungstemperatur vorliegen. Für die Gasphase ist Luft bei Umgebungsdruck und -temperatur angenommen, siehe Tabelle 6.1.

Tabelle 6.2: Eigenschaften der flüssigen Phase

Parameter		
Λ	0,75	cm^2/s
ρ_{fl}	781	kg/m^3
ν_{fl}	$1,5 \times 10^{-6}$	m^2/s
σ	0,026	N/m

6.3 Ergebnisse

Abbildung 6.6 zeigt in einer zweidimensionalen Ansicht die Form des flüssigen Wandfilms zu drei verschiedenen Zeitpunkten. Die abgebildeten instantanen Schnappschüsse sollen veranschaulichen, was am Treffpunkt beider Äste geschieht, sobald die Flüssigkeit dort angelangt. Die Flüssigphase ist rot dargestellt und die umgebende Luft blau. Sobald die Flüssigkeit das Ende der filmtragenden Wand erreicht, kommt es am Ende der Wand zu einer Stauung der flüssigen Phase. Da stromaufwärts kontinuierlich Flüssigkeit nachrückt, kommt es zu einer Anhäufung der Flüssigphase am Ende der filmtragenden Wand. Nach einer gewissen Zeit treibt die Luftströmung die angehäuften Flüssigkeitsmenge weiter voran, so dass die Front der Flüssigkeit den Kontakt zur Wand verliert und sich in der sie umgebenden Luft verformt. Die Oberfläche der Flüssigkeit

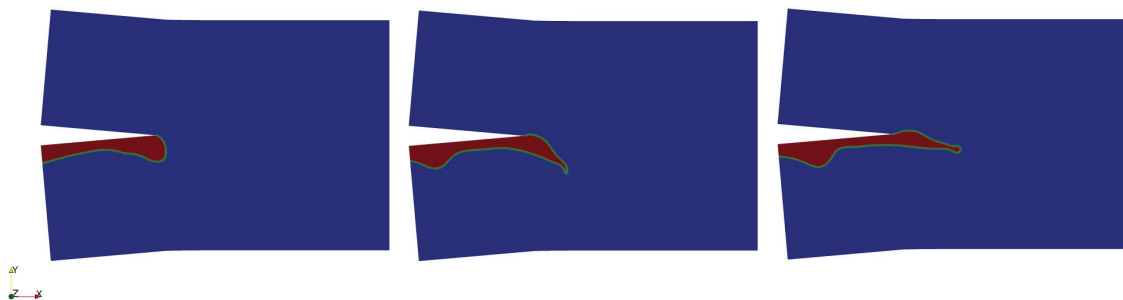


Abbildung 6.6: Verhalten des flüssigen Wandfilms am Ende der filmtragenden Wand, $\sigma = 0,026 \frac{\text{N}}{\text{m}}$. 2-d-Ansicht zu drei Zeitpunkten. Rot: Flüssigkeit, Blau: Luft

bleibt infolge der Oberflächenspannung zusammenhängend, das Flüssigkeitsvolumen erfährt eine Streckung und legt sich in dem hier vorliegenden Fall zunächst an die axiale Strömungsrichtung an.

Von dem in Abbildung 6.6 zuletzt beschriebenen Zustand ausgehend zeigt Abbildung 6.7 das Verhalten der Phasengrenze in dreidimensionaler Form. Die Phasengrenze ist in einem dunklen Grauton dargestellt und ergibt sich als Oberfläche aus dem Isowert für die Volumenfraktion von $\gamma = 0,5$. Zur räumlichen Orientierung bei der Betrachtung sind die Berandungen des Rechengebiets in hellem Grau in der Darstellung mit aufgenommen, wobei der Ausstromrand und die lateralen Ränder ausgeblendet sind. Abbildung 6.7 zeigt in vier Reihen jeweils eine instantane Aufnahme der Phasengrenze. Die Zeitachse verläuft von oben nach unten. Links ist jeweils das gesamte Rechengebiet abgebildet und rechts ist ein Teilbereich der Phasengrenze vergrößert dargestellt.

Für die vorgegebene Oberflächenspannung von $\sigma = 0,026 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ zeigt sich, dass Tröpfchen in äußerst geringem Maße entstehen. Die oberste Darstellung in Abbildung 6.7 zeigt eine einsetzende Einschnürung der Phasengrenzenfront, welche ihrerseits beginnt, eine unregelmäßige Struktur aufzuweisen. Eine Abspaltung drei kleiner Tropfen ist ebenfalls erfolgt, jedoch ist dabei bis zu jenem Zeitpunkt von einem Einzelereignis zu sprechen. Die Phasengrenze erweist sich als sehr stabil und es spalten sich zunächst keine weiteren Tröpfchen ab. Stattdessen verstärkt sich die Einschnürung - siehe zweite Reihe - und es beginnt die Abspaltung eines größeren Flüssigkeitsvolumens. Die dritte Reihe in Abbildung 6.7 zeigt das vollständig abgespaltene Fragment, an dessen Rändern eine Ligamententstehung und die Abspaltung vereinzelter kleiner Tröpfchen stattfindet. Allerdings ist die Oberfläche des Fragments stabil genug, so dass dieses bis zum Austritt aus dem Rechengebiet zum größten Teil intakt bleibt. In der linken Hälfte der untersten Reihe ist ein Teil des Fragments zu sehen, wie es das Rechengebiet verlässt. In der untersten Reihe ist ein weiteres großskaliges Fragment entstanden, an dessen Rändern wiederum Ligamente und Tröpfchen entstehen. Betrachtet man in Abbildung 6.7 die einzelnen Darstellungen in der linken Hälfte von oben nach unten, so ist entlang der filmtragenden Wand ein vorwärts schreitender Wellenberg zu sehen, welcher das vor ihm befindliche Wellental zur Abrisskante treibt. Dieses Wellental schiebt sich, nachdem es das Ende der Wand erreicht hat, mit zunehmender Dauer tiefer in den flüssigen Film, bis dieser durchtrennt wird und es so zur Abspaltung des Fragments kommt.

Aufgrund des hohen Widerstandes, den die Phasengrenze gegen ihren Zerfall aufweist, wird der Einfluss einer Verringerung der Oberflächenspannung auf das Verhalten der Flüssigkeit untersucht. Ausgehend vom ursprünglichen Wert der Oberflächenspannung von $\sigma = 0,026 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ wird dieser in zwei Schritten verkleinert. In einem ersten Schritt um 23% auf $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ und anschließend um 67% bezogen auf den anfänglichen Wert auf

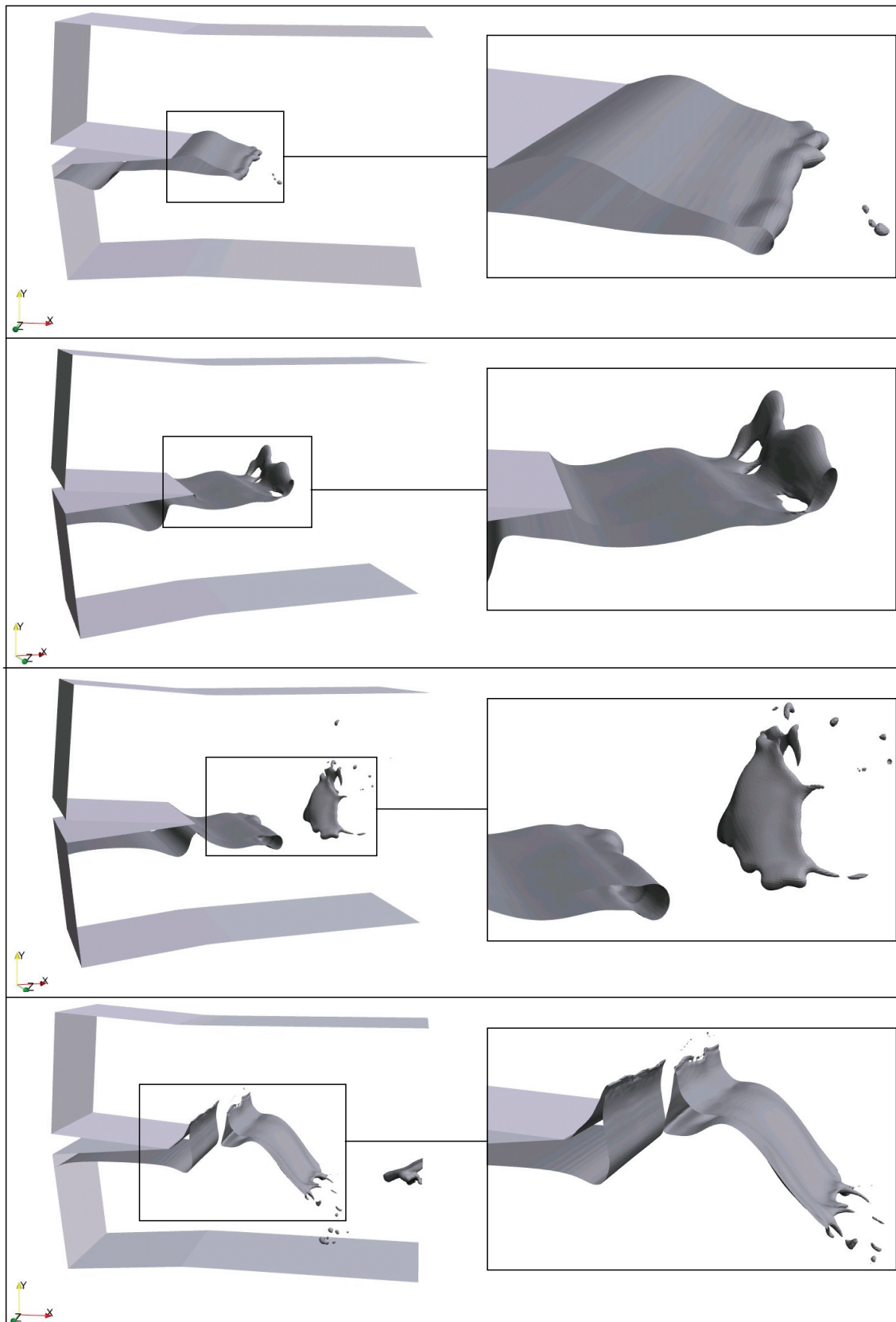


Abbildung 6.7: Instantane Darstellungen des Filmzerfalls bei einer Oberflächenspannung von $\sigma = 0,026 \frac{\text{N}}{\text{m}}$.
Links: Gesamtansicht; Rechts: Vergrößerter Teilbereich

$\sigma = 0,0085 \frac{\text{N}}{\text{m}}$. Alle übrigen Stoffwerte bleiben unverändert, so dass der Einfluss einer verringerten Oberflächenspannung isoliert wird.

Eine Verringerung der Oberflächenspannung tritt z.B. in Folge einer Temperaturerhöhung an der Phasengrenze auf. So kann für Kerosin bei dem Wert $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ nach [14] eine Temperatur an der Phasengrenze von etwa 363 K zugrunde gelegt werden. Für $\sigma = 0,0085 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ gibt [3] etwa 500 K an. Im Folgenden wird ausschließlich die Oberflächenspannung variiert. Alle weiteren Stoffdaten bleiben unverändert, um den Effekt der Oberflächenspannung isoliert zu betrachten.

Abbildung 6.8 stellt für den Fall der verringerten Oberflächenspannung $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ den flüssigen Wandfilm zu drei Zeitpunkten zweidimensional dar. Im Vergleich zum vorherigen Fall, siehe Abbildung 6.6, weist der Wellenberg entlang der filmtragenden Wand einen steileren Verlauf auf und die Flüssigkeitsfront, welche den Kontakt zur Wand verloren hat, erfährt eine ausgeprägtere Verformung.

Abbildung 6.9 zeigt die weitere Entwicklung dieses Falls in dreidimensionaler Form. Ausgehend von der Darstellung rechts in Abbildung 6.8 hat sich der vordere Teil der frei in der Luft befindlichen Phasengrenze an die Luftströmungsrichtung angelegt, siehe Abbildung 6.9 links oben im eingerahmten Teil. Unterhalb des eingerahmten Ausschnitts sind bereits abgespaltene Flüssigkeitselemente zu sehen. Diese haben sich zuvor von der Spitze der Phasengrenzenfront, siehe Abbildung 6.8 rechts, abgeschnürt. Die Darstellung oben rechts in Abbildung 6.9 zeigt im Vergleich zu der entsprechenden Darstellung in Abbildung 6.7 neben der stärker ausgeprägten Deformation der Phasengrenze ein qualitativ ähnliches Verhalten der Phasengrenzenfront. Diese beginnt wie im Fall $\sigma = 0,026 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ Unregelmäßigkeiten aufzuweisen, jedoch erfolgt im vorliegenden Fall die Entstehung kleiner länglicher Ligamente, welche sich im weiteren Verlauf abspalten und zu der Formierung von Tröpfchen führen, siehe zweite Reihe in Abbildung 6.9.

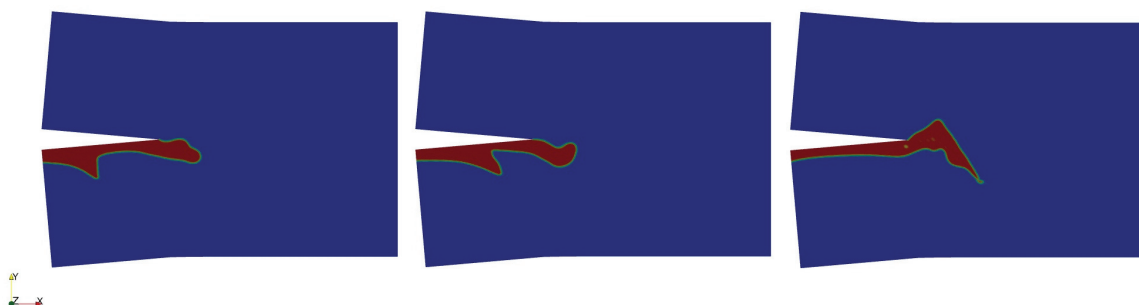


Abbildung 6.8: Verhalten des flüssigen Wandfilms am Ende der filmtragenden Wand, $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$. 2-d-Ansicht zu drei Zeitpunkten.
Rot: Flüssigkeit, Blau: Luft

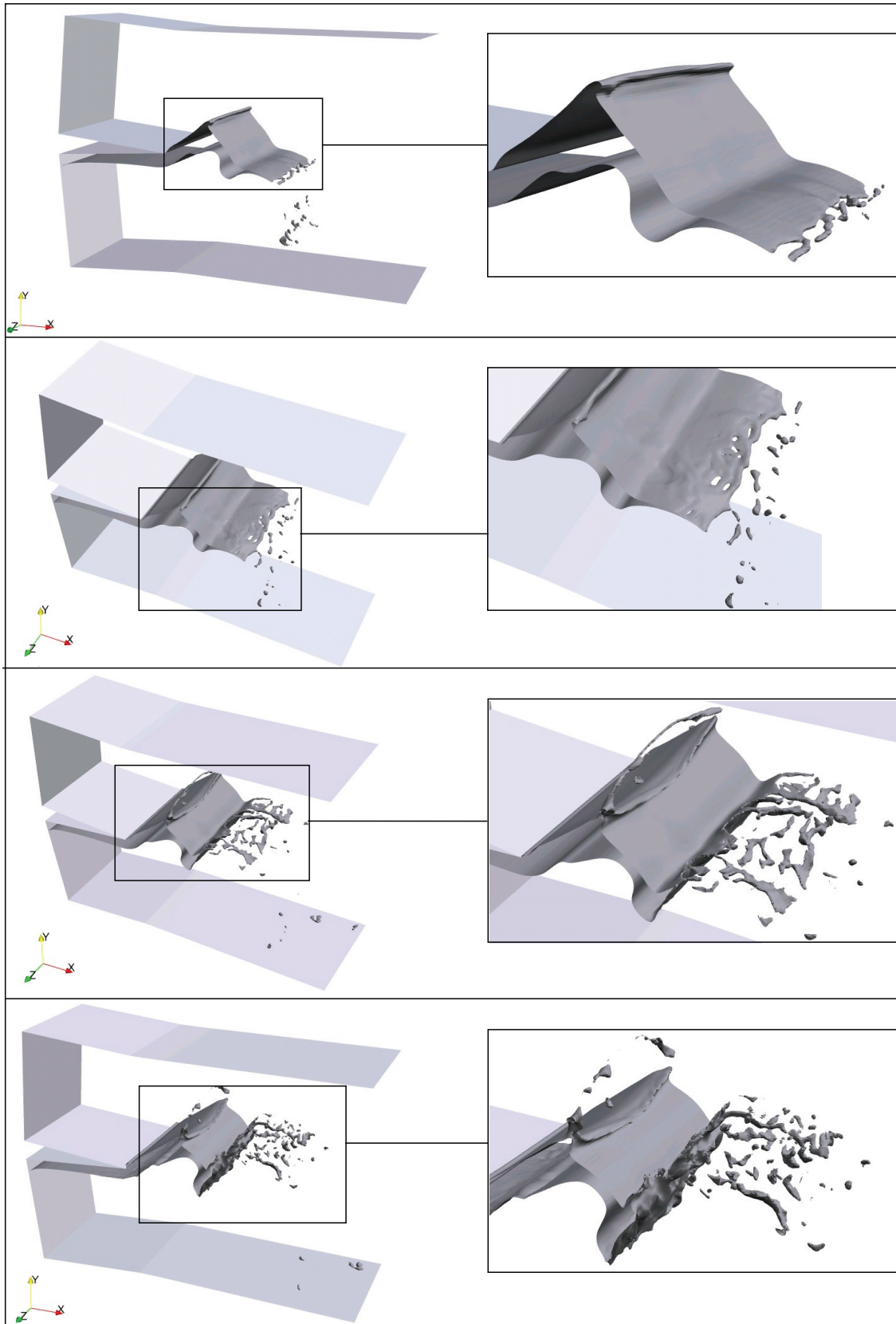


Abbildung 6.9: Instantane Darstellungen des Filmzerfalls bei einer Oberflächenspannung von $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$.
Links: Gesamtansicht; Rechts: Vergrößerter Teilbereich

Darüber hinaus beginnt die Phasengrenze ihren kontinuierlichen Zusammenhalt aufzulösen und es setzt eine Zerschierung im vorderen Bereich der Phasengrenze ein, welche ausgehend von der zweiten Reihe in Abbildung 6.9 in den nachfolgenden Darstellungen zu sehen ist, und zu einer Vielzahl kleiner flüssiger Strukturen führt.

Die Verringerung der Oberflächenspannung um 23 % führt somit zu einer deutlichen Veränderung des Filmzerfalls. Während im ersten Fall für $\sigma = 0,026 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ die Abspaltung großer Flüssigkeitsfragmente dominiert, von deren Rändern sich kleinskalige Strukturen abspalten, siehe Abbildung 6.7, tritt für den Fall $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ die Entstehung einer Vielzahl kleiner Tropfen und Ligamente in den Vordergrund, welche zum einen Teil durch Abschnürung an der Phasengrenzenfront und zum anderen Teil durch die großflächige Zerschierung des flüssigen Films entstehen, siehe Abbildung 6.9. Die Erhaltung eines großen Bereichs nach Ende der filmtragenden Wand, in dem die Phasengrenze zusammenhängend bleibt, haben beide Fälle gemeinsam.

Bevor auf eine dreidimensionale Darstellung der Phasengrenze für den Fall mit einer Oberflächenspannung von $\sigma = 0,0085 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ eingegangen wird, soll auch hier zunächst das Verhalten des flüssigen Wandfilms zweidimensional veranschaulicht werden, siehe Abbildung 6.10. Auch in diesem Fall kommt es am Ende der filmtragenden Wand zu einer Anhäufung der Flüssigkeit, einem sich anschließenden Kontaktverlust zur Wand und einer relativ starken Verformung der Flüssigkeitsfront. Darüber hinaus ist in Abbildung 6.10 in der mittleren Darstellung eine Welle mit steiler Front zu sehen, welche im weiteren Verlauf brechen wird und es zu einem Einschluss der Gasphase im Wandfilm kommt, wie in der Darstellung rechts zu sehen. Dieser Vorgang ist bei den anderen Simulationen nicht vorgekommen und ist auf den geringen Widerstand der Phasengrenze gegen die Luftströmung zurückzuführen.

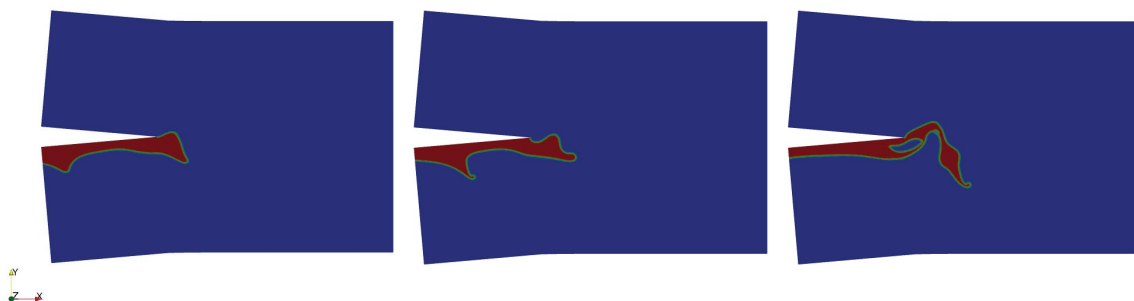


Abbildung 6.10: Verhalten des flüssigen Wandfilms am Ende der filmtragenden Wand, $\sigma = 0,0085 \frac{\text{N}}{\text{m}}$. 2-d-Ansicht zu drei Zeitpunkten.
Rot: Flüssigkeit, Blau: Luft

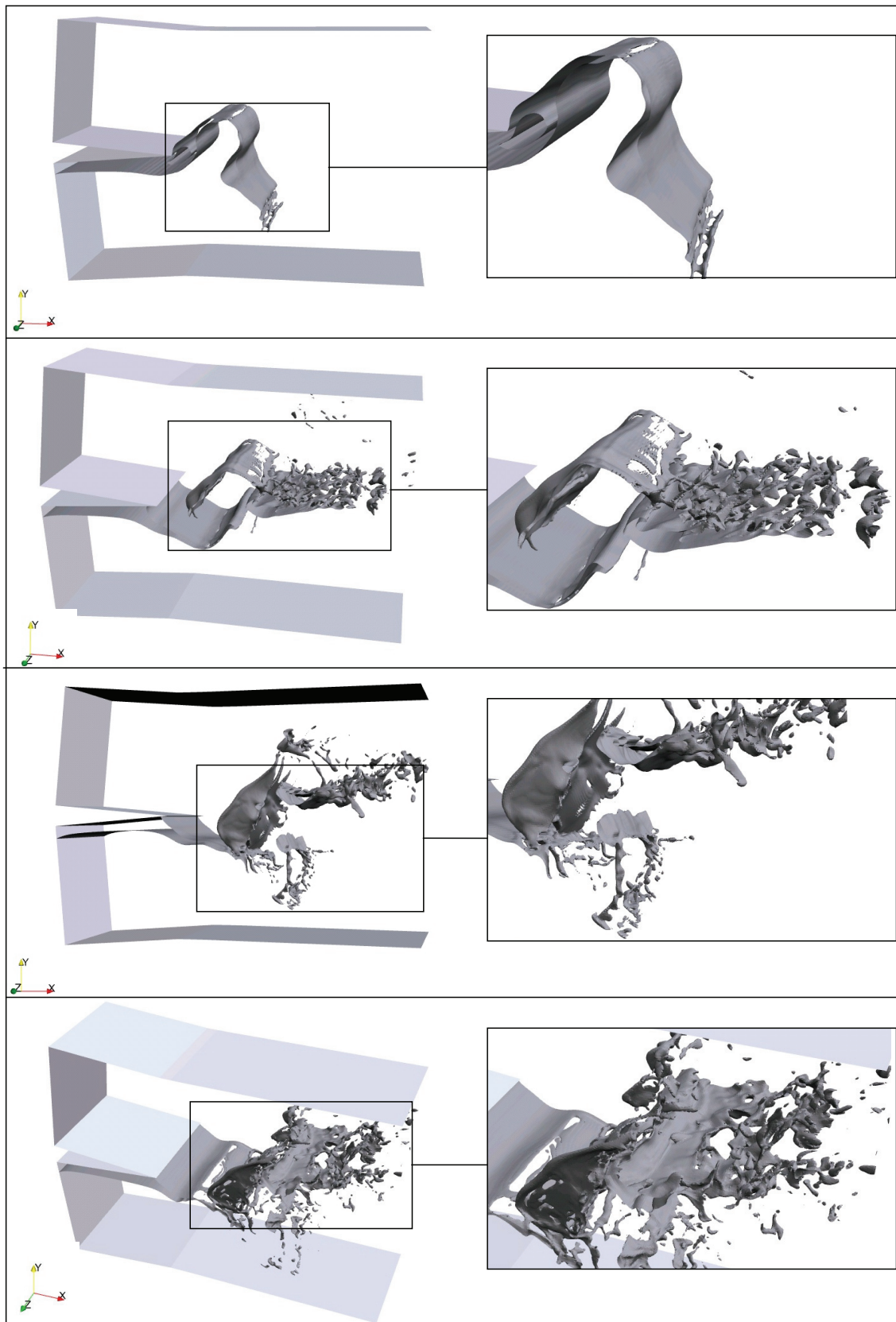


Abbildung 6.11: Instantane Darstellungen des Filmzerfalls bei einer Oberflächenspannung von $\sigma = 0,0085 \frac{\text{N}}{\text{m}}$.
Links: Gesamtansicht; Rechts: Vergrößerter Teilbereich

Abbildung 6.11 zeigt den weiteren Verlauf dieses Testfalls in dreidimensionaler Darstellung. In der obersten Reihe ist zu sehen, wie sich in Folge der starken Biegung der Phasengrenze ein großes Fragment von dem restlichen Teil der Flüssigkeit abtrennt. Zusätzlich beginnt, wie auch im vorherigen Fall beschrieben, vgl. Abbildung 6.9, die Entstehung kleiner Ligamente und Tropfen an der Phasengrenzenfront. Ebenfalls in Analogie zum vorherigen Fall zeigt die zweite Reihe in Abbildung 6.11 eine großflächige Zerschierung des flüssigen Films, wobei hier ein größeres Gebiet diesem Vorgang unterliegt. Die Folge ist ein dichtes Feld von Tropfen und Ligamenten. Darüber hinaus unterliegt der flüssige Film in seiner Gesamtheit starken Topologieänderungen und es kommt an mehreren im Raum verteilten Stellen zur Entstehung vieler kleiner flüssiger Strukturen, vgl. dritte und vierte Reihe in Abbildung 6.11.

Die im vorliegenden Fall weitere Reduktion der Oberflächenspannung führt somit im Vergleich zur Simulation mit $\sigma = 0,02 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ zur Ausdehnung des Bereichs, in dem es zur Entstehung von Tropfen und kleinskaligen flüssigen Strukturen kommt. Die stabilisierende Wirkung der Oberflächenspannung ist sehr gering, so dass noch intakte großskalige Flüssigkeitsstrukturen sehr stark deformiert werden und es zu einer starken Fragmentierung der Flüssigkeit kommt. Die Stabilität dieser Fragmente ist sehr gering und sie unterliegen schnell einem Zerfallsprozess. Da es im vorliegenden Fall an verschiedenen Orten zur gleichzeitigen Entstehung mehrerer Fragmente kommt, resultiert daraus die Entstehung von Tröpfchen in einem ausgedehnten Gebiet.



7 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit ist, einen Beitrag zur Beschreibung des dynamischen Verhaltens der Phasengrenze und des Primärzerfalls hinsichtlich flugtriebwerksrelevanter Prozesse zur Kraftstoffzerstäubung zu leisten. Ein erhöhtes Verständnis dieser Vorgänge ist ein Grundbaustein für die Optimierung von Verbrennungsprozessen, weil die Gemischbildung mit dem Primärzerfall ihren Anfang nimmt. Die experimentelle Untersuchung der komplexen Vorgänge vor und während des Primärzerfalls in unmittelbarer Nähe der Phasengrenze ist in Abhängigkeit von der Zerstäubungsintensität und der Bauteilkomplexität anwendungsnaher Konfigurationen kaum bis gar nicht möglich. Der Weg zur Erforschung dieses Gebietes ist durch Computersimulationen zu beschreiten und dazu wurden in der vorliegenden Arbeit in einem ersten Schritt Primärzerfallsprozesse mit Computersimulationen abgebildet. Dazu ist das Software-Paket OpenFOAM [59] verwendet worden, mit einem Verfahren zur Erfassung der Phasengrenze, welches auf der Volume-of-Fluid-Methode basiert. Bei den durchgeführten Simulationen handelte es sich zum größten Teil um Large-Eddy-Simulationen und Direkte Numerische Simulationen, um die Phasengrenze detailliert zu erfassen. Diese Arbeit ist im Rahmen des Graduiertenkollegs „Instationäre Systemmodellierung von Flugtriebwerken“ durchgeführt worden.

Zu diesem Zweck sind Konfigurationen ausgewählt worden, denen für Zerstäubungsprozesse in Flugtriebwerken eine hohe Bedeutung zukommt. Bei den simulierten Konfigurationen handelt es sich um

- die Entwicklung eines flüssigen Wandfilms, welcher von einer beschleunigten Luftströmung vorwärts getrieben wird,
- um den Strahlzerfall eines Kerosinjets in einer senkrecht dazu verlaufenden Luftströmung bei erhöhtem Umgebungsdruck und
- um den Zerfall eines flüssigen Wandfilms, welcher am Ende der filmtragenden Wand zwei Luftströmen ausgesetzt ist.

Die Auswahl der Konfigurationen erfolgte so, dass die verschiedenen Aspekte, die bei der Zerstäubung in Flugtriebwerken eine Rolle spielen, Berücksichtigung finden. In den heute eingesetzten Airblast-Zerstäubern nimmt der durch die Luftströmung vorwärts getriebene Kraftstoff-Wandfilm Einfluss auf den Zerfallsprozess an der Zerstäuberkannte,

weswegen eine solche Konfiguration in dieser Arbeit in Hinblick auf die Filmdickenverteilung untersucht worden ist. Der Zerfall eines Kerosinstrahls in einer senkrecht verlaufenden Luftströmung ist das favorisierte Zerstäubungskonzept für die Entwicklung von LPP-Bernnkammern, wobei in den durchgeführten Simulationen dieser Konfiguration, in Anlehnung an die Anwendung, erhöhter Umgebungsdruck berücksichtigt worden ist. Bei der Auswahl beider zuvor genannten Konfigurationen ist darauf geachtet worden, experimentelle Daten zu Vergleichszwecken vorliegen zu haben. Bei der dritten Konfiguration handelt es sich um einen generischen Testfall, zu dem keine Vergleichsdaten vorliegen. Ziel dieser Simulation war es, sowohl den Zerfallsprozess als auch die resultierenden kleinskaligen flüssigen Strukturen numerisch zu erfassen. Aufgrund des hohen Rechenaufwandes, der dazu nötig ist, die relevante großskalige strömungsführende Geometrie einerseits und die sehr feinen Tropfen andererseits aufzulösen, ist eine Vorgehensweise vorgeschlagen worden, welche es ermöglicht, nur den Bereich der Tropfenentstehung in einer hochaufgelösten Simulation abzubilden, während erforderliche Randbedingungen aus vorgeschalteten, weniger aufwendigen Simulationen bezogen worden sind.

Zunächst ist das numerische Verfahren anhand zweidimensionaler Testfälle hinsichtlich der Advektion der Phasengrenze, der Abbildung der Oberflächenspannung und der Auftriebskräfte überprüft worden. Es zeigte sich, dass die Ergebnisse in einem guten Genauigkeitsrahmen liegen und das numerische Verfahren zur Erfassung und zum Transport der Phasengrenze, durch den Verzicht einer geometrischen Rekonstruktion derselben, zum Einsatz komplexer Konfigurationen geeignet ist.

Die Simulation eines schubspannungsgetriebenen flüssigen Wandfilms in beschleunigter Luftströmung ist mittels einer instationären RANS zweidimensional berechnet worden. Trotz einer kurz gewählten Distanz zwischen dem Filmleger und der Kanalverengung zeigt die errechnete Filmhöhenverteilung entlang der gesamten Kanalverengung gute bis sehr gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Referenzwerten. Ein erneuter Anstieg der mittleren Filmhöhe nach Abschluss der Kanalverengung konnte in der Simulation jedoch nicht reproduziert werden. Offene Punkte für weitere Untersuchungen sind, den Mittelungszeitraum zu verlängern, den Einfluß einer dreidimensionalen Simulation zu überprüfen und die Filmbeladung Λ zu variieren. Das hier erhaltene Ergebnis ist positiv zu sehen, man bedenke dass der Spaltaustritt in der Simulation an einer Stelle platziert ist, an der im Experiment die Filmdicke in Folge der stromab liegenden Kanalverengung bereits kontinuierlich absinkt. Nach einem gewissen Absand zum Spaltaustritt passt sich die Simulation dem Experiment sehr gut an.

Die Large-Eddy-Simulation eines Kerosin-Jets in einer Querströmung umfasste die Untersuchung zweier Betriebspunkte und einer Gittervariation. Es konnten sowohl in der Literatur dokumentierte phänomenologische Zerfallsmechanismen erfasst werden als auch integrale Größen wie z.B. die Jet-Trajektorie erfolgreich wiedergegeben werden. Darüber hinaus konnten charakteristische Eigenschaften der windseitigen Strahloberfläche kenntlich gemacht werden. So wurde bei allen drei Simulationen die Entstehung und Amplifizierung von Instabilitäten an der windseitigen Kontur des Jets deutlich. Der bei allen Simulationen sichtbare Beginn der Wellenbildung an der Jet-Oberfläche fiel mit einer örtlich starken Biegung der Flüssigkeitssäule zusammen. Ebenfalls konnte gezeigt werden, dass bereits kurz nach dem Düsenaustritt der Jetquerschnitt seine kreisförmige Form verliert und es zur Ligamententstehung an dessen Rändern kommt. Für die Erfassung der Phasengrenzflächendynamik scheinen die verwendeten Gitter auszureichen, da die beschriebenen Effekte kenntlich gemacht werden konnten und die Jet-Trajektorie mit experimentellen Korrelationen übereinstimmt. Die Analyse der aufgelösten flüssigen Massentröme zeigt jedoch, dass ein großer Teil der durch den Primärzerfall entstehenden Strukturen durch die verwendeten Gitter nicht aufgelöst wird.

Dies führt auf den letzten Testfall, welcher anhand einer generischen Konfiguration in einem ersten Schritt ein Konzept einführt, welches als eingebettete DNS bezeichnet wird. Der Testfall beschreibt die DNS eines flüssigen Wandfilms, welcher am Ende der filmtragenden Wand von zwei Luftströmen erfasst wird und zerschert. Die Bereitstellung von Randbedingungen erfolgt durch vorgeschaltete Simulationen geringeren Rechenaufwands. Die Vorzüge von Computersimulationen sind an diesem Testfall deutlich geworden. Es sind drei DNS-Rechnungen durchgeführt worden wobei der Einfluss der Oberflächenspannung auf den Filmzerfall bei sonst unveränderten Parametereinstellungen, isoliert worden ist. Experimentell sind solche Parametervariationen oftmals nicht zu bewerkstelligen. Sowohl die Zerschierung des flüssigen Films als auch die entstandenen kleinskaligen Strukturen konnten durch das Gitter erfasst werden. Die Variation der Oberflächenspannung hat zu deutlichen Unterschieden des Filmzerfalls geführt. Als temperaturabhängige Größe ist der Wert für die Oberflächenspannung bei Simulationen ausgewählter Betriebspunkte anwendungsnaher Konfigurationen sorgfältig zu wählen. Dazu ist neben dem Einfluss der Gastemperatur auf die Dichte des Fluids, abzuschätzen, welche Temperatur an der Phasengrenze herrscht, um so Rückschlüsse auf die herrschende Oberflächenspannung zu machen.

Diese Arbeit legt das Potential der Untersuchung von Zerfallsprozessen mittels detaillierter numerischer Simulationen dar. Die Phasengrenze kann hinsichtlich ihres dynamischen Verhaltens untersucht werden, was mit Experimenten nur in seltenen Fällen mög-

lich ist. Es hat sich aber auch gezeigt, dass es enormen Rechenaufwand erfordert, die resultierenden kleinskaligen flüssigen Strukturen zu erfassen und ihre weitere Entwicklung im Strömungsfeld zu verfolgen. Für eine verbesserte numerische Beschreibung von Verbrennungsprozessen ist dies jedoch von hoher Bedeutung, denn mit zunehmender Genauigkeit der numerischen Modelle und Methoden für die Berechnung von Sprays im Rahmen der Euler-Euler- oder der Euler-Lagrange-Methode, welche das verdampfte Kraftstoff-Luft-Gemisch Verbrennungssimulationen zur Verfügung stellen können, rückt die Vorgabe verlässlicher Anfangs- und Randbedingungen für Spraysimulationen in den Vordergrund, so dass eine Kopplung zwischen dem Primärzerfall und der Sprayberechnung erzielt werden kann. Die Weiterentwicklung des vorgestellten Konzeptes der eingebetteten DNS kann dazu beitragen, eine Brücke zwischen Primärzerfall und Sprayströmung zu schlagen. Kopplungen zwischen Phasengrenzen auflösenden Verfahren und der Lagrange-Methode, wobei kleine sphärische Partikel während der Simulation in eine Lagrange-Beschreibungsweise überführt werden [29], sind ebenfalls ein vielversprechender Ansatz. Darüber hinaus ist auch die Berücksichtigung von Phasenwechselvorgängen infolge Verdampfung bei Phasengrenzen auflösenden Simulationen ein wichtiger Aspekt, denn Zerfalls- und Verdampfungsprozesse sind in technischen Anwendungen nicht zwingend räumlich getrennt.

Literaturverzeichnis

- [1] Becker, J. und C. Hassa. *Breakup and Atomization of a Kerosene Jet in Crossflow at Elevated Pressure*. ATOMIZATION AND SPRAYS, 12(1-3):49–67, 2002.
- [2] Bell, J., P. Colella und H. Glaz. *A 2nd-Order Projection Method for the Incompressible Navier Stokes Equations*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 85(2):257–283, 1989.
- [3] Bellofiore, A. *Experimental and Numerical Study of Liquid Jets Injected in High-Density Air Crossflow*. Dissertation, University of Naples Federico II, 2006.
- [4] Bianchi, G. M., F. Minelli, R. Scardovelli und S. Zaleski. *3d Large Scale Simulation of the High-Speed Liquid Jet Atomization*. SAE International, 2007.
- [5] Brackbill, J., D. Kothe und C. Zemach. *A Continuum Method for Modeling Surface-Tension*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 100(2):335–354, 1992.
- [6] Breuer, M. *Direkte Numerische Simulation und Large-Eddy-Simulation turbulenter Strömungen auf Hochleistungsrechnern*. Shaker, Aachen, 2002.
- [7] de Villiers, E. und D. A. Gosman. *Large Eddy Simulation of Primary Diesel Spray Atomization*. SAE World Congress, 2004.
- [8] Deardorf, J. W. *A Numerical Study of 3 Dimensional Turbulent Channel Flow at Large Reynolds Numbers*. JOURNAL OF FLUID MECHANICS, 41:453–480, 1970.
- [9] Desjardins, O. und H. Pitsch. *A Spectrally Refined Interface Approach for Simulating Multiphase Flows*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 228(5):1658–1677, 2009.
- [10] Desjardins, O., V. Moureau, E. Knudsen, M. Herrmann und H. Pitsch. *Conservative Level Set/Ghost Fluid Method for Simulating Primary Atomization*. PROC. ANNU. CONF. LIQ. ATOM. SPRAY SYST. AM., 20th. ILASS Am.:Pap. 34, 2007.
- [11] Desjardins, O., V. Moureau und H. Pitsch. *An Accurate Conservative Level Set/Ghost Fluid Method for Simulating Turbulent Atomization*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 227(18):8395–8416, 2008.
- [12] Drew, D. *Mathematical Modeling of 2-Phase Flow*. ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS, 15:261–291, 1983.

-
- [13] Drew, D. A. und S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, New York u.a., 1999.
- [14] Dubovkin, N. F., V. G. Malanicheva und M. N. Kuznetsova. *Surface Tension of Jet Fuels*. CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF FUELS AND OILS, 5(12):55–58, 1969.
- [15] Ebner, J. *Einfluss von Druckgradienten in der Gasströmung auf die Dynamik schubspannungsgetriebener Wandfilme*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 2004.
- [16] Ebner, J., P. Schober, O. Schafer, R. Koch und S. Wittig. *Modelling of Shear-Driven Liquid Wall Films: Effect of Accelerated Air Flow on the Film Flow Propagation*. PROGRESS IN COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS, 4(3-5):183–190, 2004.
- [17] Ebner, J., P. Schober, O. Schäfer und S. Wittig. *Modelling of Shear-Driven Liquid Wall Films on Curved Surfaces: Effect of Accelerated Air Flow and Variable Film Load*. 9th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS, Sorrento, Italy), 2003.
- [18] Fedkiw, R., T. Aslam, B. Merriman und S. Osher. *A Non-Oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method)*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 152(2):457–492, 1999.
- [19] Ferziger, J. H. und M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin u.a., 3., rev. edition, 2002.
- [20] Fox, R. O. *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2003.
- [21] Fureby, C., A. D. Gosman, G. Tabor, H. G. Weller, N. Sandham und M. Wolfshtein. *Large Eddy Simulation of Turbulent Channel Flows*. TURBULENT SHEAR FLOWS, 11, 1997.
- [22] Germano, M., U. Piomelli, P. Moin und W. H. Cabot. *A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model*. PHYSICS OF FLUIDS, 3(7):1760–1765, 1991.
- [23] Ghosal, S. und P. Moin. *The Basic Equations for the Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows in Complex-Geometry*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 118(1):24–37, 1995.
- [24] Gokulakrishnan, P., M. Ramotowski, G. Gaines, C. Fuller, R. Joklik, L. D. Eskin, M. S. Klassen und R. J. Roby. *A Novel Low Nox Lean, Premixed, and Prevaporized Combustion System for Liquid Fuels*. JOURNAL OF ENGINEERING FOR GAS TURBINES AND POWER-TRANSACTIONS OF THE ASME, 130(5), 2008.

-
- [25] Gorokhovski, M. und M. Herrmann. *Modeling Primary Atomization*. ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS, 40:343–366, 2008.
- [26] Gueyffier, D., J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli und S. Zaleski. *Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 152(2):423–456, 1999.
- [27] Herrmann, M. *A Balanced Force Refined Level Set Grid Method for Two-Phase Flows on Unstructured Flow Solver Grids*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 227(4):2674–2706, 2008.
- [28] Herrmann, M. *Detailed Numerical Simulations of the Primary Atomization of a Turbulent Liquid Jet in Crossflow*. JOURNAL OF ENGINEERING FOR GAS TURBINES AND POWER-TRANSACTIONS OF THE ASME, 132(6):–, 2010.
- [29] Herrmann, M. *Detailed Simulations of the Breakup Process of Turbulent Liquid Jets in Subsonic Crossflows*. 11th ICLASS, Vail, Colorado USA, July 2009.
- [30] Hill, D. P. *The Computer Simulation of Dispersed Two-Phase Flows*. Dissertation, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1998.
- [31] Hirsch, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Wiley, Chichester, 1991.
- [32] Hirt, C. und B. Nichols. *Volume of Fluid (Vof) Method for the Dynamics of Free Boundaries*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 39(1):201–225, 1981.
- [33] Hong, J., T. Shinar, M. Kang und R. Fedkiw. *On Boundary Condition Capturing for Multiphase Interfaces*. JOURNAL OF SCIENTIFIC COMPUTING, 31(1-2):99–125, 2007.
- [34] IEA. *How the Energy Sector Can Deliver on a Climate Agreement in Copenhagen*. Technischer Bericht, International Energy Agency, 2009.
- [35] IEA. *Key World Energy Statistics*. Technischer Bericht, International Energy Agency, 2009.
- [36] Ishii, M. und T. Hibiki. *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. Springer Science+Business Media, Boston, 2006.
- [37] Ishimoto, J., H. Hoshina, T. Tsuchiyama, H. Watanabe, A. Haga und F. Sato. *Integrated Simulation of the Atomization Process of a Liquid Jet through a Cylindrical Nozzle*. INTERDISCIPLINARY INFORMATION SCIENCES, 13:7–16, 2007.
- [38] Issa, R. *Solution of the Implicitly Discretized Fluid-Flow Equations by Operator-Splitting*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 62(1):40–65, 1986.

-
- [39] Jasak, H. *Error Analysis and Estimation for Finite Volume Method with Applications to Fluid Flow*. Dissertation, Imperial College, University of London, 1996.
- [40] Jones, W. und B. Launder. *Prediction of Laminarization with a 2-Equation Model of Turbulence*. INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER, 15(2):301–314, 1972.
- [41] Kim, D., O. Desjardins, M. Herrmann und P. Moin. *Toward Two-Phase Simulation of the Primary Breakup of a Round Liquid Jet by a Coaxial Flow of Gas*. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, 2006.
- [42] Klein, A., A. Sadiki und J. Janicka. *A Digital Filter Based Generation of Inflow Data for Spatially Developing Direct Numerical or Large Eddy Simulations*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 186(2):652–665, 2003.
- [43] Klein, M. *Direkte Numerische Simulation des Primären Strahlzerfalls in Einstoffzerstäuberdüsen*. Dissertation, VDI-Verl., 2003.
- [44] Kolmogorov, A. *The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous-Fluid for Very Large Reynolds Numbers*. PROCEEDINGS OF THE ROYAL SOCIETY OF LONDON SERIES A-MATHEMATICAL PHYSICAL AND ENGINEERING SCIENCES, 434(1890):9–13, 1991.
- [45] Lafaurie, B., C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski und G. Zanetti. *Modeling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with Surfer*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 113(1):134–147, 1994.
- [46] Launder, B. und B. Sharma. *Application of the Energy Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow near a Spinning Disc*. LETTERS IN HEAT AND MASS TRANSFER, 1:131–138, 1974.
- [47] Lazlik, W., T. Doerr, S. Bake, R. v.d. Bank und L. Rackwitz. *Development of Lean-Burn Low-Nox Combustion Technology at Rolls-Royce Deutschland*. PROCEEDINGS OF THE ASME TURBO EXPO, 3:797–807, 2008.
- [48] Lee, K., C. Aalburg, F. Diez, G. M. Faeth und K. A. Sallam. *Primary Breakup of Turbulent Round Liquid Jets in Uniform Crossflows*. AIAA JOURNAL, 45(8):1907–1916, 2007.
- [49] Lefebvre, A. *The Role of Fuel Preparation in Low-Emission Combustion*. JOURNAL OF ENGINEERING FOR GAS TURBINES AND POWER-TRANSACTIONS OF THE ASME, 117(4):617–654, 1995.
- [50] Lefebvre, A. H. *Atomization and Sprays*. Hemisphere Publ., New York u.a., 1989.

-
- [51] Lilly, D. K. *The Representation of Small-Scale Turbulence in Numerical Simulation Experiments*. PROCEEDINGS OF THE IBM SCIENTIFIC COMPUTING SYMPOSIUM ON ENVIRONMENTAL SCIENCES, 320(1951):195 – 210, 1967.
- [52] Malik, M., E. Fan und M. Bussmann. *Adaptive Vof with Curvature-Based Refinement*. INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, 55(7):693–712, 2007.
- [53] Menard, T., P. A. Beau, S. Tanguy, F. X. Demoulin und A. Berlemont. *Primary Break up Modeling, Part A: Dns, a Tool to Explore Primary Break Up*. Proc. Int. Conf. Liq. Atom. Spray Syst., 10th (ICLASS-2006) Kyoto, Japan, 2006.
- [54] Menard, T., S. Tanguy und A. Berlemont. *Coupling Level Set/Vof/Ghost Fluid Methods: Validation and Application to 3d Simulation of the Primary Break-up of a Liquid Jet*. INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW, 33(5):510–524, 2007.
- [55] Merker, G. N. P., F. Otto, C. Schwarz und G. Stiesch. *Simulating Combustion*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, 2006.
- [56] Moin, P. und J. Kim. *Tackling Turbulence with Supercomputers*. SCIENTIFIC AMERICAN, 276(1):62–68, 1997.
- [57] Olsson, E., G. Kreiss und S. Zahedi. *A Conservative Level Set Method for Two Phase Flow II*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 225(1):785–807, 2007.
- [58] Olsson, E. und G. Kreiss. *A Conservative Level Set Method for Two Phase Flow*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 210:225–246, 2005.
- [59] OpenCFD Ltd. 2007, <http://www.opencfd.co.uk>.
- [60] Openfoam Programmer's Guide. 2009, Nabla Ltd., <http://www.nabla.co.uk>.
- [61] Pai, M. G., I. Bermejo-Moreno, O. Desjardins und H. Pitsch. *Role of Weber Number in Primary Breakup of Turbulent Liquid Jets in Crossflow*. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, 2009.
- [62] Pai, M. G., O. Desjardins und H. Pitsch. *Detailed Simulations of Primary Breakup of Turbulent Liquid Jets in Crossflow*. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, 2008.
- [63] Patankar, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor and Francis, London, 1980.
- [64] Pope, S. B. *Turbulent Flows*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 5. print. edition, 2008.

-
- [65] Popinet, S. und S. Zaleski. *A Front-Tracking Algorithm for Accurate Representation of Surface Tension*. INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, 30(6):775–793, 1999.
- [66] Prosperetti, A. *Motion of 2 Superposed Viscous Fluids*. PHYSICS OF FLUIDS, 24(7):1217–1223, 1981.
- [67] Richardson, L. F. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1922.
- [68] Rider, J. und D. Kothe. *Comments on Modelling Interfacial Flows with Volume-of-Fluid Methods*. Technischer Bericht, Los Alamos National Laboratory, 1995.
- [69] Rider, W. und D. Kothe. *Stretching and Tearing Interface Tracking Methods*. AIAA JOURNAL, pages 95–1717, 1995.
- [70] Rider, W. und D. Kothe. *Reconstructing Volume Tracking*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 141(2):112–152, 1998.
- [71] Rudman, M. *Volume-Tracking Methods for Interfacial Flow Calculations*. INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, 24(7):671–691, 1997.
- [72] Rusche, H. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Dissertation, Imperial College, University of London, 2002.
- [73] Sagaut, P. *Large Eddy Simulations for Incompressible Flows*. Springer, Berlin u.a., 2001.
- [74] Sagaut, P., P. Comte und F. Ducros. *Filtered Subgrid-Scale Models*. PHYSICS OF FLUIDS, 12(1):233–236, 2000.
- [75] Salewski, M. *LES of Jets and Sprays Injected into Crossflow*. Dissertation, Lund Institute of Technology, 2006.
- [76] Salewski, M. und L. Fuchs. *Consistency Issues of Lagrangian Particle Tracking Applied to a Spray Jet in Crossflow*. INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW, 33(4):394–410, 2007.
- [77] Sallam, K., C. Aalburg und G. Faeth. *Breakup of Round Nonturbulent Liquid Jets in Gaseous Crossflow*. AIAA JOURNAL, 42(12):2529–2540, 2004.
- [78] Scardovelli, R. und S. Zaleski. *Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow*. ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS, 31:567–603, 1999.

-
- [79] Schumann, U. *Subgrid Scale Model for Finite-Difference Simulations of Turbulent Flows in Plane Channels and Annuli*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 18(4):376–404, 1975.
- [80] Smagorinsky, J. *General Circulation Experiments with the Primitive Equations*. MONTHLY WEATHER REVIEW, 91:99–164, 1963.
- [81] Spurk, J. H. und N. Aksel. *Strömungslehre, Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer, Berlin u.a., 7. edition, 2007.
- [82] Stenzler, J., J. Lee, D. Santavicca und W. Lee. *Penetration of Liquid Jets in a Cross-Flow*. ATOMIZATION AND SPRAYS, 16(8):887–906, 2006.
- [83] Sussman, M., K. Smith, M. Hussaini, M. Ohta und R. Zhi-Wei. *A Sharp Interface Method for Incompressible Two-Phase Flows*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 221(2):469–505, 2007.
- [84] Sussman, M., P. Smereka und S. Osher. *A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible 2-Phase Flow*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 114(1):146–159, 1994.
- [85] Sussman, M. und E. Puckett. *A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3d and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 162(2):301–337, 2000.
- [86] Tryggvason, G., B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas und Y.-J. Jan. *A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 169(2):708–759, 2001.
- [87] Ubbink, O. *Numerical Prediction of Two-Fluid Systems with Sharp Interfaces*. Dissertation, Imperial College, University of London, 1997.
- [88] Van Der Pijl, S., A. Segal, C. Vuik und P. Wesseling. *A Mass-Conserving Level-Set Method for Modelling of Multi-Phase Flows*. INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, 47(4):339–361, 2005.
- [89] Waclawczyk, T. und T. Koronowicz. *Comparison of Cicsam and Hric High-Resolution Schemes for Interface Capturing*. JOURNAL OF THEORETICAL AND APPLIED MECHANICS, 46(2):325–345, 2008.
- [90] Wu, P., K. Kirkendall, R. Fuller und A. Nejad. *Breakup Processes of Liquid Jets in Subsonic Crossflows*. JOURNAL OF PROPULSION AND POWER, 13(1):64–73, 1996.

-
- [91] Yoshizawa, A. und K. Horiuti. *A Statistically-Derived Subgrid-Scale Kinetic-Energy Model for the Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows*. JOURNAL OF THE PHYSICAL SOCIETY OF JAPAN, 54(8):2834–2839, 1985.
- [92] Zalesak, S. *Fully Multidimensional Flux-Corrected Transport Algorithms for Fluids*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 31(3):335–362, 1979.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Nikolaos Spyrou
Geburtsdatum	20. Januar 1980
Geburtsort	Frankfurt am Main

Schul Ausbildung

1986 bis 1990	Uhlandschule in Frankfurt am Main
1990 bis 1998	Heinrich von Gagern Gymnasium in Frankfurt am Main
1998 bis 2000	Max-Beckmann-Schule in Frankfurt am Main

Studium

10/2000 bis 10/2006	Technische Universität Darmstadt Fachrichtung: Allgemeiner Maschinenbau
---------------------	--

Beruflicher Werdegang

seit 11/2006	Wissenschaftlicher Mitarbeiter Technische Universität Darmstadt Fachgebiet für Energie- und Kraftwerkstechnik
--------------	---